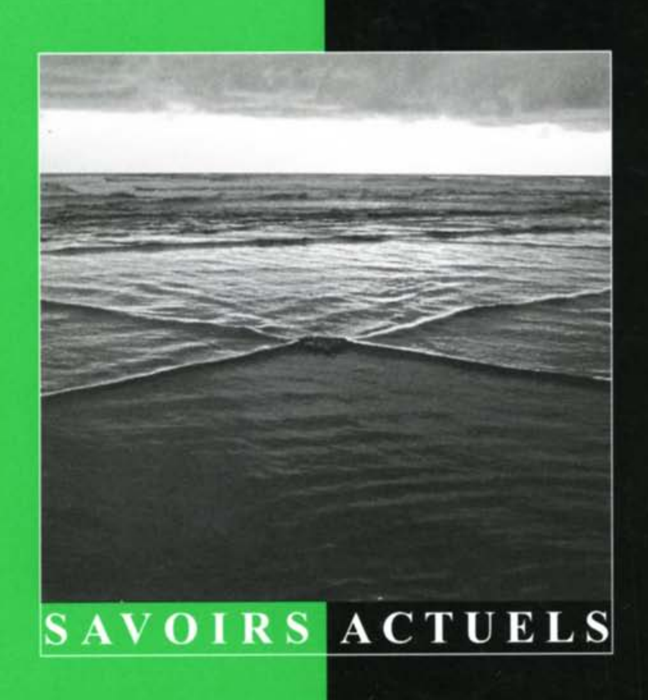


Michel PEYRARD - Thierry DAUXOIS

Physique des solitons



SAVOIRS ACTUELS





Michel Peyrard et Thierry Dauxois

Physique des solitons

SAVOIRS ACTUELS
EDP Sciences/CNRS Éditions

Illustration de couverture : Collision de deux solitons de faible amplitude photographiée sur une plage de l'état d'Oregon sur la côte ouest des États-Unis (Photographie Terry Toedtemeier, 1978).

ISBN EDP Sciences 2-86883-732-8

ISBN CNRS ÉDITIONS 2-271-06267-5

Avant-propos

DEPUIS LA PREMIÈRE OBSERVATION d'un *soliton* par John Scott Russell en 1834, ces ondes solitaires à la stabilité exceptionnelle ont fasciné les scientifiques, d'abord en raison de leurs propriétés expérimentales très spectaculaires, de leur indéniable élégance, mais également à cause des propriétés mathématiques remarquables des systèmes intégrables ayant des solutions de type soliton. L'aspect mathématique a été privilégié dans la plupart des ouvrages consacrés aux solitons car il conduit à de très beaux développements théoriques comme par exemple la méthode d'inversion des données de diffusion qui permet de résoudre une équation *non linéaire* complexe par une série d'étapes qui sont toutes *linéaires* (cf. chap. 7).

Pourtant, au delà des aspects mathématiques, la *physique* des solitons est toute aussi intéressante et pertinente pour la recherche moderne. Ainsi, de nombreuses d'expériences sur la condensation de Bose-Einstein, objet du prix Nobel de Physique 2001, s'analysent à partir de l'équation de Schrödinger non linéaire, présentée au chapitre 3, qui est l'une des grandes équations de la théorie des solitons. Le prix Nobel de Chimie, attribué en 2000 à Heeger, MacDiarmid et Shirakawa doit encore plus aux solitons car les porteurs de charge dans les polymères conducteurs sont des solitons. Le chapitre 13 s'appuie sur un article de Su, Schrieffer et Heeger pour expliquer ces phénomènes.

Ainsi, la physique des solitons est un domaine actif de la recherche, auquel nous avons contribué, mais ce livre n'est cependant pas un ouvrage de recherche. Il se propose de présenter la physique des solitons de manière pédagogique, abordable par un étudiant en fin de licence ou début de master ayant seulement des connaissances de base en physique générale, en mécanique analytique et en mécanique quantique. Il est issu d'un cours donné d'abord par Michel Peyrard à l'université de Dijon puis sous une forme plus complète dans le cadre du DEA de Physique statistique et Phénomènes non linéaires de l'École Normale Supérieure de Lyon, et poursuivi maintenant par Thierry Dauxois dans le Master de Sciences de la matière de l'École Normale Supérieure de Lyon.

L'ouvrage n'a pas la prétention d'être exhaustif mais il est conçu de façon à donner néanmoins une vision assez complète du sujet. Les fondements sont introduits dans la partie I qui présente les grandes équations à solitons à

partir d'exemples de la physique macroscopique. Les méthodes théoriques sont présentées dans la partie II. Le choix des développements dans ce domaine a été effectué en pensant aux situations physiques comme le montrent les applications présentées dans les parties III et IV consacrées à des problèmes de la physique des solides ou des macromolécules biologiques. La modélisation, qui est l'étape qui permet de passer du système physique aux équations non linéaires qui le décrivent, est illustrée tout au long de l'ouvrage, mais aussi discutée dans un chapitre spécifique (chap. 4) car c'est un point difficile et particulièrement important.

L'approche en terme de solitons permet de renouveler en profondeur le point de vue sur certains problèmes physiques. Nous montrons ainsi comment les solitons peuvent être utilisés pour traiter la physique statistique des ferroélectriques (chap. 10) ou d'un modèle pour l'ADN (chap. 15). La bibliographie contient de nombreuses références d'articles qui devraient permettre au lecteur qui le souhaite d'aller plus loin et de trouver les éléments pour aborder la recherche sur la physique des solitons. Enfin, nous avons souhaité inclure quelques éléments biographiques sur les principaux fondateurs de ce domaine car, comme le disait le philosophe Whitehead au début du XXe siècle, « une science qui refuse de se souvenir de ses fondateurs est condamnée ».

L'ouvrage a mûri au fil des années de cours et de travaux dirigés, mais il doit aussi beaucoup à tous ceux qui en ont fait une relecture critique, en particulier Geneviève Peyrard qui a fait de multiples remarques pertinentes. Plusieurs collègues, Mariette Barthès, Freddy Bouchet, Hervé Courtois, Jacques Dauxois, Sébastien Dusuel, Jean-Noël Gence, Ioannis Kourakis, Juan Mazo, Guy Millot, Jean-Pierre Nguenang, Sébastien Paulin, Hicham Qasmi, Florence Raynal, Yves-Henri Sanéjouand, ont examiné plus particulièrement les chapitres proches de leur domaine de recherche. Nous remercions également Larissa Brizhik, Lincoln D. Carr, Thierry Cretegny, Bernard Deconinck, Chris Eilbeck, Ying Li, Robert I. Odom, Sylvian R. Ray, Harvey Segur, Terry Toedtemeier, Nadezhda Tsypkina, Kathleen T. Zanotti de nous avoir autorisés à utiliser certaines photographies ou pour des informations complémentaires. Nous tenons enfin à remercier tout spécialement Martin D. Kruskal et Norman J. Zabusky de nous avoir fourni des éléments sur les débuts de l'histoire des « solitons ».

Février 2004,

Michel Peyrard, Thierry Dauxois.

Table des matières

Introduction

Le XIXe SIÈCLE et la première moitié du XXe siècle ont marqué le triomphe de la *physique linéaire*, d'abord à travers les équations de Maxwell, puis avec la mécanique quantique dont tout le formalisme repose sur la linéarité associée au principe de superposition. Les outils mathématiques de la physique étaient eux-mêmes fondamentalement des outils linéaires comme la transformée de Fourier, la théorie de la réponse linéaire, les approches perturbatives, etc.

Bien entendu, les physiciens avaient identifié l'importance des phénomènes non linéaires qui apparaissaient dans les équations de Navier-Stokes de l'hydrodynamique, la théorie de la gravitation, les effets collectifs associés aux interactions entre particules en physique des solides, etc. Mais, dans la plupart des cas, on cherchait à éviter les non linéarités ou à les traiter comme des perturbations des théories linéaires.

En revanche, pendant les quarante dernières années, l'importance du *traitement intrinsèque* des non linéarités a été de mieux en mieux perçue et a conduit à deux concepts réellement révolutionnaires par rapport aux idées antérieures, l'attracteur étrange et le soliton.

Ces deux concepts correspondent à deux propriétés étonnantes des systèmes non linéaires, qui semblent contradictoires. L'attracteur étrange est associé à la notion de *chaos* dans un système régi par des équations déterministes. On le rencontre même dans des systèmes à faible nombre de degrés de liberté, que l'on aurait pu croire « simples ». Au contraire, le soliton concerne des systèmes à grand nombre de degrés de liberté. *A priori* il semble que l'addition de nouveaux degrés de liberté devrait compliquer le comportement, et pourtant ce n'est pas toujours le cas. Des *structures spatiales cohérentes* peuvent apparaître grâce à des effets collectifs et conduire au contraire à une *auto organisation*. La compréhension de la coexistence entre structures cohérentes et chaos dans les systèmes non linéaires est encore une question ouverte.

Le soliton est une *onde solitaire* c'est-à-dire localisée spatialement, dont les propriétés de stabilité sont spectaculaires. Dès sa première observation [135] en 1834 par un ingénieur hydrodynamicien, John Scott Russell, il a suscité passion et débats. J.S. Russell a été tellement fasciné par cette observation inattendue qu'il a consacré dix années de sa vie à étudier le phénomène, tandis

que les théories, fondées sur des approches linéarisées, montraient ... que le soliton ne pouvait pas exister. Le soliton a une histoire à éclipses puisqu'après l'observation de 1834, il a fallu attendre 1895 pour qu'une théorie [85] puisse en rendre compte grâce à l'équation obtenue par Korteweg et de Vries. Puis le phénomène a été oublié jusqu'à ce qu'une expérience numérique [55], faite par Fermi, Pasta et Ulam en 1953 sur un des premiers ordinateurs à Los Alamos, révèle un phénomène étonnant. Un réseau unidimensionnel de particules couplées par un potentiel non linéaire n'atteignait pas toujours l'équilibre thermodynamique comme on le pensait. L'énergie injectée initialement dans un mode commençait, comme prévu, à se distribuer vers les autres modes, mais elle revenait ensuite pratiquement intégralement vers le mode excité initialement. Ce n'est que dix ans plus tard que l'explication a été donnée par Zabusky et Kruskal [160] ; elle fait intervenir les solitons comme nous le verrons dans ce livre. C'est ce travail qui, en 1965, a introduit le terme de *soliton*. Ce n'est pas un hasard si ce nom fait penser à celui d'une particule. Le soliton est une onde, mais il correspond aussi à un maximum localisé dans la densité d'énergie du système, qui se propage en conservant sa forme et sa vitesse, comme le ferait une particule. On dispose ainsi d'une solution d'une équation de champ *classique* qui possède à la fois les propriétés d'une quasi-particule et celles d'une onde. On trouve là des caractéristiques que l'on n'attend que dans les systèmes quantiques. L'analogie peut être poussée plus loin puisqu'on peut même mettre en évidence un effet tunnel pour les solitons [114].

Le travail de Zabusky et Kruskal a constitué un véritable tournant dans l'histoire des solitons qui, à partir de cette date, sont restés sur le devant de la scène et ont donné lieu à d'innombrables travaux, aussi bien sur le plan mathématique que sur le plan physique.

Les équations à solitons, au sens mathématique du terme, fournissent des exemples remarquables de systèmes totalement intégrables possédant un nombre infini de degrés de liberté. C'est la raison pour laquelle elles ont tant intéressé les mathématiciens, au point que beaucoup d'ouvrages sur les solitons sont fortement orientés vers les aspects mathématiques de la théorie.

Pourtant les solitons concernent aussi les physiciens et ils sont même devenus indispensables pour décrire des phénomènes tels que la propagation de certaines ondes en hydrodynamique, les ondes localisées dans les plasmas astrophysiques, la propagation de signaux dans les fibres optiques, ou des aspects beaucoup plus microscopiques comme les phénomènes de transport de charge dans les polymères conducteurs, les modes localisés dans des cristaux magnétiques, la dynamique de macromolécules biologiques comme l'ADN et les protéines par exemple. Bien entendu, tous ces systèmes ne sont décrits qu'approximativement par les équations de la théorie des solitons. On parle alors de quasi-solitons. Mais la caractéristique remarquable des solitons est qu'ils sont exceptionnellement stables vis-à-vis des perturbations. Ils sont en outre capables de se former spontanément dans un système physique auquel on fournit de l'énergie, par exemple sous forme thermique, par une onde

électromagnétique ou une action mécanique, même si l'excitation initiale ne correspond pas exactement à un soliton. C'est cette propriété qui fait tout l'intérêt des solitons en physique car, si un système possède des caractéristiques permettant l'existence de solitons, et nous verrons que c'est le cas pour beaucoup d'entre eux, il existe alors une très forte chance qu'une excitation intense conduise à leur formation.

Les solitons fournissent souvent une approche fructueuse pour décrire la physique d'un système non linéaire. Au lieu de faire une approximation linéaire, puis de traiter les non linéarités comme une perturbation, il peut être beaucoup plus efficace de décrire approximativement la physique du système par une équation à solitons puis, si nécessaire, de tenir compte des contributions qui perturbent les solitons.

L'objet de cet ouvrage est de traiter la *physique des solitons* en montrant comment ce concept intervient dans de nombreux domaines grâce à un parcours en trois étapes.

La première partie présente les grandes classes d'équations à solitons à partir de situations tirées de la physique macroscopique. Dans chaque cas nous partons d'un exemple où l'observation directe des solitons est facile et nous montrons comment les équations physiques conduisent à des équations de champ non linéaires ayant des solutions solitons. Cette partie permet de comprendre les principales propriétés des solitons et les caractéristiques qu'un système physique doit présenter pour permettre leur existence. Le dernier chapitre de cette première étape discute plus en détails la modélisation en termes de solitons en s'appuyant sur la physique des plasmas. Il montre en particulier comment *un* système donné peut être décrit par *plusieurs* types d'équations à solitons, selon les conditions dans lesquelles on le place.

La deuxième partie introduit quelques méthodes mathématiques pour l'étude des solitons. Bien que les aspects mathématiques ne soient pas l'objectif principal de l'ouvrage, ces méthodes sont importantes pour les applications physiques car le système auquel on s'intéresse n'est jamais décrit exactement par une équation à solitons. Il faut donc pouvoir évaluer et étudier l'influence des termes que l'on a négligés quand on a proposé une description par une équation à solitons. Cette partie présente des techniques qui sont rarement introduites dans les ouvrages traitant de la théorie mathématique des solitons car elles concernent justement des systèmes qui ne sont pas exactement décrits par une équation à solitons. Le physicien a aussi besoin de savoir comment évolue dans le temps une condition initiale appliquée à un système. Pour répondre à cette question on peut faire appel à une méthode mathématique très élégante, la méthode d'inversion des données de diffusion, qui parvient à réduire la recherche de la solution d'une équation non linéaire à une séquence d'opérations linéaires. Nous présentons une introduction à cette méthode.

La dernière étape, constituée des troisième et quatrième parties de l'ouvrage, est consacrée à la physique microscopique – physique des solides ou physique des molécules biologiques – où les descriptions en termes de solitons ont permis de traiter de nombreux problèmes. À cette échelle on ne « voit » plus directement les solitons, mais on les détecte par leur influence sur les propriétés du système. Outre le passage des équations physiques aux équations à solitons, comme dans la première partie, il faut donc aussi discuter les méthodes d'observation des solitons. De plus, à ce niveau, les fluctuations thermiques ne sont plus négligeables. Elles peuvent interagir avec les solitons dont il faut étudier la dynamique dans un système qui n'est plus au repos. Par ailleurs, les solitons eux-mêmes interviennent directement dans les propriétés thermodynamiques du système que leur présence peut modifier. Nous verrons aussi, par exemple dans les ferroélectriques ou dans le cas de l'ADN, que le concept de soliton est très puissant pour étudier théoriquement la thermodynamique de certains systèmes.

La beauté de la science du non linéaire se situe sans doute dans les liens qu'elle tisse entre différents domaines qui partagent une description mathématique commune. Cette généralité n'est pas sans rappeler celle de la thermodynamique puisque dans les deux cas c'est la structure mathématique abstraite (qui dérive bien sûr des symétries et des lois de la physique) qui est cruciale. Cet ouvrage montre comment quelques équations fondamentales permettent de traiter des systèmes physiques extrêmement variés, du macroscopique au microscopique, unifiant ainsi des domaines que l'on considère souvent comme totalement différents tels que l'hydrodynamique et la dynamique des macromolécules biologiques.

Bien entendu, il reste encore de nombreuses questions ouvertes dans la physique des systèmes non linéaires et les concepts que nous introduisons ici sont en train de pénétrer dans des domaines très différents tels que la biologie, la sociologie, l'économie, l'épidémiologie, l'écologie, etc. Nous espérons que cet ouvrage donnera au lecteur l'envie de s'aventurer dans l'exploration de ces questions ouvertes, en gardant à l'esprit l'étonnante capacité de nombreux systèmes à créer des structures spatiales cohérentes d'une remarquable stabilité qui peuvent influencer profondément leurs propriétés.

Première partie

Les différentes classes de solitons

Chapitre 1

Solitons non-topologiques : l'équation de Korteweg-de Vries

CE CHAPITRE introduit la notion de soliton à partir de la première observation expérimentale qui en a été faite, puis il en étudie les principales caractéristiques, en particulier les conditions d'existence. Il montre comment l'on peut obtenir la solution soliton par une méthode élémentaire qui peut être utilisée dans d'autres systèmes pour prévoir l'existence d'ondes solitaires.

Nous considérons ensuite un premier exemple physique, facile à réaliser expérimentalement, permettant de suivre en détail la démarche qui conduit à une description en terme de solitons pour un système discret, c'est-à-dire constitué d'éléments juxtaposés pour former un réseau. C'est une situation que l'on rencontre particulièrement en physique des solides, comme nous le verrons dans la troisième partie. Un second exemple, celui des ondes de pression sanguine, montre que les solitons peuvent être présents dans des domaines où on ne les attend pas (!).

1.1 La découverte

1.1.1 Les observations de John Scott Russell

La toute première observation d'un soliton est celle que fit l'ingénieur hydrodynamicien John Scott Russell en 1834 alors qu'il se promenait à cheval le long d'un canal près d'Édimbourg. Lorsqu'une péniche s'arrêta brusquement, il fut surpris par la vision de ce qu'il appela « la grande onde solitaire », qu'il suivit pendant plusieurs kilomètres avant de la perdre dans les méandres du canal. La description qu'il en a faite traduit l'enthousiasme d'un scientifique qui a ensuite consacré une dizaine d'années à étudier le phénomène. Comme nous le verrons, elle contient déjà les éléments fondamentaux pour la mise en équation et la recherche de la solution permettant d'analyser les observations :

> J'observais le mouvement d'un bateau qui était tiré rapidement le long d'un canal étroit par une paire de chevaux quand, soudain, le bateau s'arrêta. Mais il n'en fut pas de même pour la masse d'eau qu'il avait mise en mouvement dans le canal. Elle s'accumula autour de la proue du bateau dans un état de violente agitation, puis, soudainement, l'abandonna, roula vers l'avant à grande vitesse, prenant la forme d'une grande élévation solitaire, d'un paquet d'eau rond, à la forme douce et bien définie, qui continua sa course dans le canal, apparemment sans changement de forme ou diminution de vitesse.
>
> Je la suivis à cheval et la dépassais alors qu'elle roulait encore à la vitesse de 8 ou 9 miles à l'heure, préservant sa forme originale de 30 pieds de long et d'un pied et demi en hauteur. La hauteur diminua peu à peu, et après une poursuite d'un ou deux miles, je la perdais dans les méandres du canal. Tel fut, dans le mois d'août 1834, ma première rencontre avec ce magnifique et singulier phénomène.

L'interprétation théorique de cette observation a cependant dû attendre 1895 avec les travaux de Korteweg et de Vries qui ont proposé l'équation qui maintenant porte leur nom (abrégée souvent en équation de KdV). Cette équation se trouvait pourtant de façon implicite [108] dans les travaux de Joseph Valentin de Boussinesq (1842-1929) publiés en 1872 [31].

Cette équation de KdV est l'une des équations prototypes de la théorie des solitons car elle a des propriétés mathématiques remarquables. Son étude permet de comprendre les idées fondamentales de la notion de soliton, mais son obtention à partir des équations de l'hydrodynamique en eau peu profonde est un peu fastidieuse. Elle est présentée dans l'appendice A et n'est valable que lorsque la profondeur de fluide et la hauteur de la vague sont faibles devant sa largeur le long de la direction de propagation. On peut noter que la première condition correspond à l'observation initiale de J.S. Russell qui parle d'une vague de 30 pieds de long pour un pied et demi en hauteur.

La figure 1.1 schématise un dispositif analogue à ceux que J.S. Russell a utilisés pour étudier expérimentalement la « grande onde solitaire ». Les ondes sont engendrées par un piston placé à l'extrémité d'un canal. J.S. Russell a pu vérifier les propriétés suivantes :

- Une excitation initiale produit selon son amplitude et sa forme une, deux, ou plusieurs ondes solitaires.
- Les ondes se propagent à une vitesse supérieure à la vitesse des ondes linéaires de grande longueur d'onde $c_0 = \sqrt{gh}$, où g désigne l'accélération de la pesanteur et h la profondeur d'eau dans le canal. L'écart à c_0 est proportionnel à la hauteur de la vague η : la vitesse de propagation suit par conséquent une loi de la forme $v = c_0(1 + A\eta)$.
- On n'observe pas d'ondes solitaires de type dépression.

Les études menées par J.S. Russell ont été très controversées dans la communauté scientifique de l'époque qui était habituée à considérer les effets

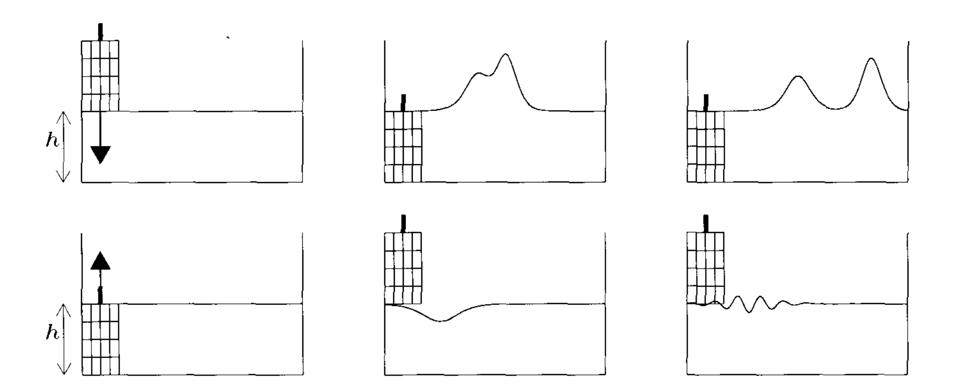


FIG. 1.1 - Évolution schématique d'une perturbation de la surface de l'eau dans un réservoir créée par le mouvement d'un piston vers le bas ou vers le haut.

non-linéaires comme secondaires et ont suscité de nombreux débats qui ont contribué à mettre en relief les propriétés étonnantes des solitons.

Les solitons hydrodynamiques sont des structures dynamiques localisées qui se propagent en conservant leur forme et leur vitesse, mais qui ne peuvent exister au repos. De part et d'autre du soliton, le milieu est dans le même état. On parle de *soliton non topologique*, par opposition à une autre classe de solitons, présentée au chapitre 2, qui interpolent entre deux états différents et peuvent exister au repos.



Après avoir observé une onde solitaire sur un canal près d'Édimbourg, l'ingénieur écossais JOHN SCOTT RUSSELL (1808-1882) a consacré de nombreuses années de son existence à étudier le phénomène de soliton. Cette découverte fut une véritable révélation pour lui. Ses contemporains n'ont malheureusement jamais partagé son enthousiasme, et il fallut attendre plus de cent trente années pour que les scientifiques réalisent réellement l'importance de sa découverte. Fils d'un membre du clergé [51], il était appelé à perpétuer la tradition ; sa passion pour les sciences l'en détourna ! (Photographie, 1850, © tous droits réservés).

J.S. Russell obtint son baccalauréat à l'âge de 16 ans à l'université de Glasgow, après des études dans les universités de Saint Andrews et d'Édimbourg. Malgré d'indéniables prédispositions aux études scientifiques, il décida de travailler deux années dans une industrie. Après ce bref

intermède, il tenta de retourner à l'université d'Édimbourg, cette fois-ci pour y enseigner. Malgré des qualités reconnues d'enseignant ainsi qu'une lettre de recommandation élogieuse de John Hamilton, sa candidature ne fut pas retenue face à celle de James David Forbes, connu pour ses contributions à la théorie du transfert de la chaleur ainsi qu'en glaciologie.

Sa carrière d'ingénieur fut en revanche beaucoup plus brillante puisqu'il amé-liora grandement en 1833 les transports en commun par voiture à vapeur. Cela lui permit d'acquérir très rapidement une excellente réputation. C'est la raison pour laquelle l'« Union Canal Society » d'Édimbourg lui demanda de mettre au point un système de navigation avec des bateaux à vapeur sur les canaux d'Édimbourg et de Glasgow, à la place du système de halage par des chevaux.

Il fut donc engagé pour mettre au point des barges à l'aide d'expériences qu'il effectuait dans une portion du canal dédiée à ses travaux. C'est dans ce cadre, à 6 miles du centre d'Édimbourg et tout prêt de l'emplacement actuel de l'université Heriot-Watt, qu'il découvrit lors du mois d'août 1834 un soliton. À la suite de cette découverte, il effectua plusieurs expériences dans des canaux, rivières et lacs, mais aussi dans un réservoir de 10 m de long, tout spécialement conçu au fond de son jardin. Il fit un premier rapport en 1838, avant de publier [135] le résultat de plusieurs expériences en 1844.

Ce rapport fut malheureusement très mal accueilli par deux personnalités qui ruinèrent toutes ses espérances. Ce fut, tout d'abord, l'illustre astronome Sir G.B. Airy (1801-1892) qui critiqua très fortement ses travaux dans un papier sur les marées et les vagues publié en 1845. Son argument essentiel était que la formule obtenue pour la vitesse de l'onde solitaire était en contradiction avec sa propre théorie des ondes en eau peu profonde ! Bien qu'ayant étudié les travaux de J.S. Russell avec plus de précautions, G.G. Stokes (1819-1903), l'un des pères de la mécanique des fluides, aboutit à la conclusion qu'une onde solitaire ne pouvait exister dans les liquides en l'absence de viscosité. Cela signa l'arrêt des recherches de J.S. Russell.

Il se consola notamment en effectuant en 1842 l'une des premières mesures expérimentales du décalage de fréquence que le physicien autrichien Doppler (1803-1853) avait décrit auparavant et que l'on appelle, désormais, l'effet Doppler. Il participa également à la conception d'un bateau gigantesque, le *Great Eastern* : long de 207 m et large de 25, ce bateau participa à la mise en place du premier câble télégraphique, à travers l'océan atlantique, reliant l'Angleterre aux États-Unis d'Amérique. Nul ne savait à l'époque qu'une autre classe de solitons, les solitons optiques, serait envisagée pour les télécommunications transatlantiques du XXIe siècle !

J.S. Russell ne disparut cependant pas sans une reconnaissance justifiée puisque le scientifique français Joseph Valentine de Boussinesq (1842-1929) pro-posa une nouvelle description des ondes en eau peu profonde, admettant des solutions similaires à celle qu'il avait découverte. Ces résultats, confirmés en 1876 par des travaux de Lord Rayleigh (1842-1919), ironiquement ancien élève de G.G. Stokes, puis en 1885 par Adhémar Jean-Claude Barré de Saint Venant

(1797-1886), permirent d'établir une théorie mathématique correcte de ces phénomènes, et donc de découvrir aussi les erreurs de Sir G.B. Airy et de G.G. Stokes !

À l'occasion d'une conférence, dédiée aux solitons et à leurs applications, qui se déroulait précisément à Édimbourg en 1982, plusieurs scientifiques tentèrent de recréer une onde solitaire dans le fameux canal cher à J.S. Russell. Ce fut un échec à la suite de problèmes techniques ! En 1995, lors d'une autre conférence, après quelques tentatives infructueuses, le résultat fut plus probant comme le montre la photographie 1.2 qui met en évidence un bel exemple d'onde solitaire. Les auteurs de ce livre font partie des spectateurs admiratifs (cf. Fig. 1.2) alors que Martin Kruskal, à l'origine de la compréhension mathématique [160] des propriétés, et donc de l'importance des solitons (cf. partie 8), est assis dans le bateau. Un bel hommage !



FIG. 1.2 – Onde solitaire recréée dans le Canal de l'Union en 1995 près d'Édimbourg, 161 ans après la découverte par John Scott Russell de ce qu'il a appelé « *The great solitary wave* » (Photographie Chris Eilbeck et Heriot-Watt University, 1995).

1.1.2 L'interprétation de Korteweg-de Vries

En écrivant les équations d'Euler pour le fluide (supposé incompressible et non visqueux), les conditions aux limites au fond, à la surface, et, en supposant que l'écoulement est irrotationnel, on peut parvenir à l'équation de Korteweg-de Vries, valable dans le cas faiblement non-linéaire (cf. appendice A) :

$$\frac{1}{c_0}\frac{\partial \eta}{\partial t} + \frac{\partial \eta}{\partial x} + \frac{3}{2h}\,\eta\frac{\partial \eta}{\partial x} + \frac{h^2}{6}\frac{\partial^3 \eta}{\partial x^3} = 0 \quad , \tag{1.1}$$

où $c_0 = \sqrt{gh}$ est la vitesse de propagation des ondes linéaires dans la limite des grandes longueurs d'onde, h la profondeur, et η la hauteur de la surface de liquide au-dessus de son niveau d'équilibre.

En passant dans le repère mobile à la vitesse c_0, c'est-à-dire en effectuant la transformation $X = x - c_0 t$ et $T = t$, il est possible d'éliminer le second terme et l'équation devient

$$\frac{1}{c_0}\frac{\partial \eta}{\partial T} + \frac{3}{2h}\,\eta\frac{\partial \eta}{\partial X} + \frac{h^2}{6}\frac{\partial^3 \eta}{\partial X^3} = 0 \quad . \tag{1.2}$$

Enfin, en introduisant des variables adimensionnées bien choisies ($\phi = \eta/h$, $\xi = X/X_0$ et $\tau = T/T_0$ où X_0 est une longueur et T_0 un temps), on peut mettre cette équation sous sa forme standard :

$$\frac{\partial \phi}{\partial \tau} + 6\phi\frac{\partial \phi}{\partial \xi} + \frac{\partial^3 \phi}{\partial \xi^3} = 0 \quad . \tag{1.3}$$

L'équation de KdV possède, entre autres, les solutions localisées spatialement suivantes

$$\phi = A\,\mathrm{sech}^2\left[\sqrt{\frac{A}{2}}\,(\xi - 2A\tau)\right] \qquad (A > 0) \quad , \tag{1.4}$$

où la fonction $\mathrm{sech}\,x = 1/\cosh x$. Ces solutions sont en accord quantitatif avec les observations de J.S. Russell. De plus la condition $A > 0$, nécessaire pour l'existence de ce type de solutions, correspond au fait que l'on n'observe pas d'ondes solitaires de type dépression à la surface de l'eau[1]. La largeur du soliton, que l'on peut définir par $L = \sqrt{2/A}$, décroît lorsque l'amplitude augmente, comme le montre la figure 1.3. Elle tend vers l'infini lorsque l'amplitude tend vers 0.

En revenant aux variables dimensionnées, dans le repère du laboratoire, la solution s'écrit

$$\eta = \eta_0\,\mathrm{sech}^2\left[\frac{1}{2h}\sqrt{\frac{3\eta_0}{h}}\left(x - c_0\left[1 + \frac{\eta_0}{2h}\right]t\right)\right] \quad . \tag{1.5}$$

1. Il a été récemment montré que l'on pouvait créer expérimentalement des solitons hydrodynamiques en forme de dépression à la condition que la tension superficielle soit importante [52]. Les expériences sont effectuées avec du mercure. L'équation du mouvement n'est plus exactement l'équation de KdV.

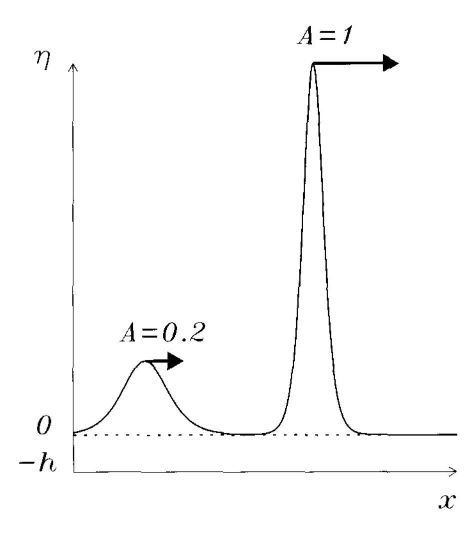


FIG. 1.3 - Comparaison entre les solutions que l'on obtient pour différentes valeurs de l'amplitude A. Le pulse de gauche, d'amplitude et de vitesse modérées, est plus large que celui de droite, qui se propage beaucoup plus rapidement.

On note que la vitesse de propagation du soliton est supérieure à la vitesse c_0 : on dit que le soliton de KdV est *supersonique* et l'on peut vérifier que, comme l'avait mesuré J.S. Russell, l'écart à c_0 est proportionnel à η_0, la hauteur de la vague au dessus de la surface.

1.1.3 Propriétés de l'équation de KdV et de ses solutions

L'équation de KdV (1.3) est une équation qui apparaît, dans de très nombreux domaines de la physique, à chaque fois que des ondes peuvent se propager dans un milieu *faiblement non-linéaire et faiblement dispersif*, comme nous le verrons par la suite.

Essayons tout d'abord de comprendre l'effet physique des différents termes. Le terme non-linéaire $\phi(\partial\phi/\partial\xi)$ tend à favoriser la formation de fronts raides ou d'ondes de choc. On sait que l'équation linéaire

$$\frac{\partial\phi}{\partial\tau} + v\frac{\partial\phi}{\partial\xi} = 0 \tag{1.6}$$

est une équation d'onde qui possède des solutions de la forme $\phi = f(\xi - v\tau)$ qui se propagent par conséquent à la vitesse v. Si l'on considère maintenant l'équation, dite de Burgers,

$$\frac{\partial\phi}{\partial\tau} + \phi\frac{\partial\phi}{\partial\xi} = 0 \quad , \tag{1.7}$$

en assimilant le coefficient de $\partial\phi/\partial\xi$ à la vitesse de propagation de l'onde, il est facile de se convaincre qu'en première approximation, chaque portion du signal se propage à la vitesse ϕ. Les portions correspondant aux grandes valeurs de ϕ vont par conséquent avoir tendance à se propager plus vite que les portions de plus faible amplitude. Le terme non-linéaire induit donc la formation d'ondes de choc, c'est-à-dire des solutions présentant des discontinuités à temps fini, où le champ $\phi(\xi)$ présente une pente verticale, comme le confirme la solution exacte de l'équation de Burgers, représentée sur la figure 1.4.

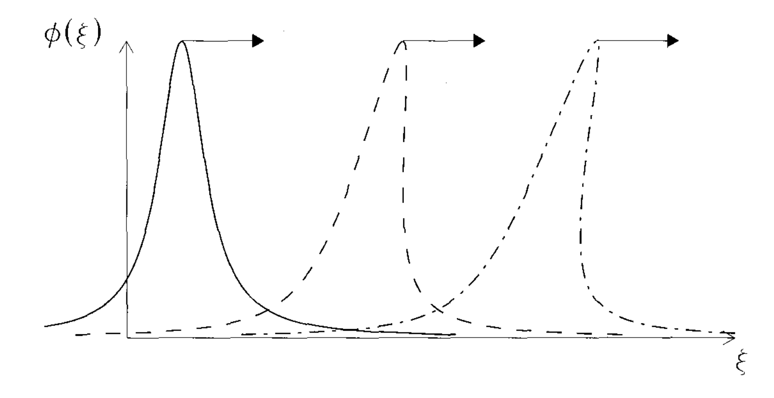


FIG. 1.4 – Évolution d'un pulse dont la dynamique est régie par l'équation de Burgers (1.7).

Considérons maintenant la version linéarisée de l'équation (1.3)

$$\frac{\partial\phi}{\partial\tau} + \frac{\partial^3\phi}{\partial\xi^3} = 0 \tag{1.8}$$

Elle admet comme solution les ondes planes du type $\phi = A\ e^{i(q\xi - \omega\tau)}$ à la condition que la pulsation ω et le nombre d'onde q soient reliés par la relation de dispersion $\omega = -q^3$. Cette relation de dispersion peut sembler surprenante mais sa forme tient au fait que l'équation de KdV est écrite dans le repère mobile à la vitesse c_0. En partant de l'équation (1.2), on aurait obtenu $\omega' = c_0 q'(1 - q'^2 h^2/6)$ qui a une forme plus habituelle.

Quel que soit le repère choisi, on observe que ces ondes possèdent une vitesse de phase $v_\phi = \omega/q$ qui dépend de la valeur du nombre d'onde q, ce qui caractérise un milieu dispersif. Dans un tel milieu, les composantes de Fourier d'une impulsion étroite se propagent à des vitesses différentes, entraînant un étalement de l'impulsion comme le montre la figure 1.5.

L'existence de la solution soliton de l'équation de KdV résulte de l'équilibre entre ces deux effets, non-linéarité et dispersion : la non-linéarité a tendance à localiser l'excitation alors que la dispersion l'étale. Il est essentiel de noter que c'est un *équilibre stable*. Si l'on part d'une condition initiale trop étroite, la dispersion prédomine et l'onde aura tendance à s'étaler jusqu'à ce que

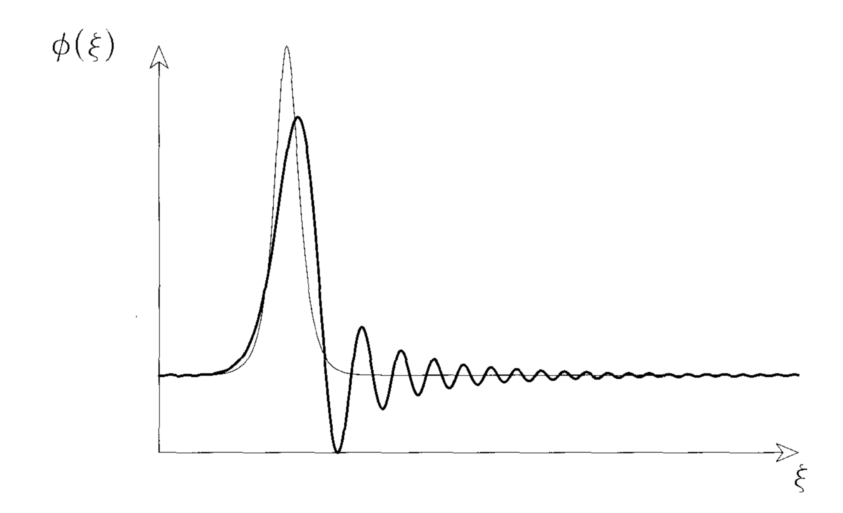


FIG. 1.5 – Évolution du même pulse que celui de la figure 1.4, dans le cas d'une dynamique régie par l'équation linéaire dispersive (1.8).

l'équilibre soit atteint. Au contraire, si l'on part d'une condition initiale trop étalée, la dispersion sera nettement dominée par la non-linéarité qui aura tendance à localiser la solution jusqu'à ce que l'équilibre soit atteint également. C'est cette propriété remarquable qui rend le concept de soliton si utile et si fascinant.

Il existe cependant des situations où cet équilibre ne peut être atteint du fait de perturbations extérieures. C'est ce qui se passe lorsqu'une telle onde se propage dans un milieu où la profondeur h décroît au fur et à mesure que la vague avance. Le terme dispersif en h^2 de l'équation (1.1) diminue alors que le terme non-linéaire en $1/h$ croît. La non-linéarité l'emportant, la vague tend d'abord à accroître son amplitude en devenant plus étroite, puis déferle (cf. fig. 1.6) comme une vague sur une plage.

L'exemple de la plage est évidemment un exemple extrême où la perturbation agit toujours dans le même sens et finit par détruire le soliton. En général le soliton se révèle extrêmement *stable* en présence de perturbations et en particulier en présence de désordre. C'est cette propriété de stabilité exceptionnelle qui explique l'étendue et la diversité des applications de la théorie des solitons, même si les situations physiques ne sont qu'approximativement décrites par les équations à solitons en général, et par l'équation de KdV en particulier. Le soliton est ainsi parfaitement capable de se propager sur un fond irrégulier. Cela explique qu'il soit assez facile de l'observer en milieu naturel. Ainsi le mascaret de la Seine, qui était engendré par la marée remontait, l'estuaire de la Seine comme un soliton, jusqu'à ce que l'on creuse le chenal pour permettre aux gros bateaux de remonter jusqu'à Rouen. La profondeur

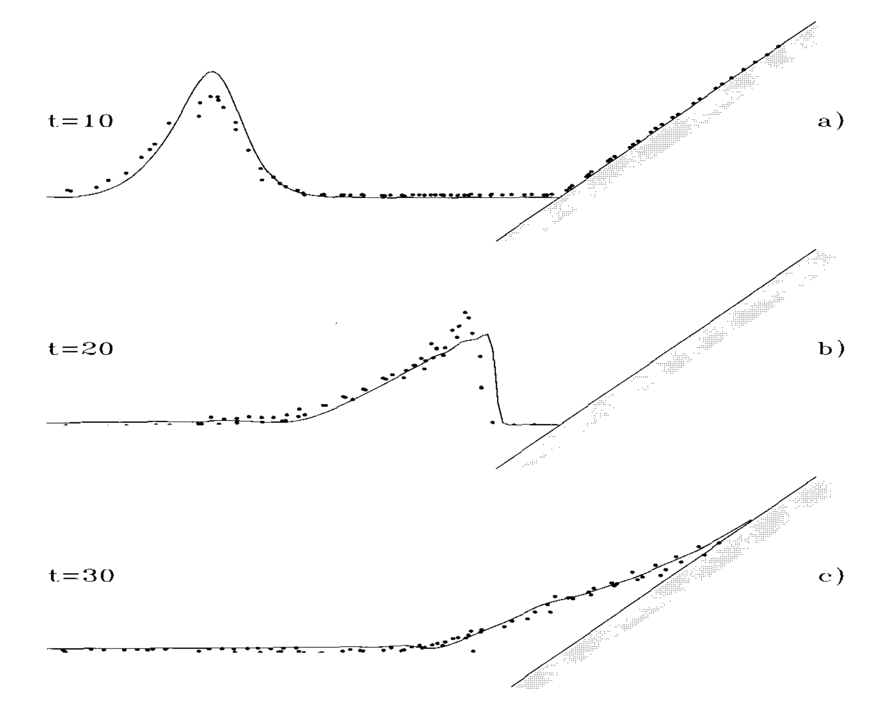


FIG. 1.6 – Évolution d'une vague solitaire lorsque la profondeur décroît en arrivant sur un rivage (représenté en grisé). Les symboles correspondent à des relevés expérimentaux [144], alors que les courbes continues ont été obtenues à l'aide de simulations numériques [95]. La hauteur du pulse par rapport à la surface libre de l'eau est égale à 0,3 fois la profondeur du fluide à grande distance du rivage.

étant désormais plus grande, les effets non-linéaires ne sont plus suffisants pour équilibrer la dispersion et le mascaret a presque totalement disparu.

On trouve des phénomènes similaires ailleurs sur la planète et, notamment, au moment des grandes marées de pleine lune, en février/mars, à l'embouchure de l'Amazone dans le Nord du Brésil lorsque la marée monte. Cela donne naissance à une vague de 5 m de hauteur, se propageant à des vitesses de l'ordre de 30 m/s, qui peut remonter certains bras du fleuve sur plusieurs centaines de kilomètres : les indiens Tupi appellent cette vague, « *pororoca* », que l'on peut traduire approximativement par « bruit gigantesque ». Bien que provoquant régulièrement d'énormes dégâts, cette vague a donné naissance à une compétition qui consiste à surfer sur la vague le plus longtemps possible, les surfeurs devant en outre se méfier des nombreux débris charriés par l'Amazone ainsi que des alligators, anacondas et piranhas !

Il existe d'autres situations qui sont très bien décrites par l'équation de KdV, notamment les violents raz-de-marée qui déferlent sur les rivages en détruisant tout sur leur passage. Celui du 17 juillet 1998 sur la côte Nord de la

Papouasie-Nouvelle-Guinée tua plus de 2 200 personnes. Ces *tsunamis* (terme qui signifie, en japonais, « grande vague dans le port ») sont des ondes marines qui provoquent de gigantesques murs d'eau dévastateurs [45]. Les *tsunamis* sont décrits de manière très satisfaisante par l'équation de Korteweg-de Vries car, bien que se déplaçant dans des océans dont la profondeur moyenne est de 4 000 m, leur longueur d'onde dépasse les 100 km, justifiant l'approximation de propagation d'ondes en eau peu profonde. Un rapide calcul met également en évidence qu'à ces profondeurs la vitesse de propagation des *tsunamis*, puisque supersonique, sera supérieure à $c_0 = \sqrt{gh} = 200$ m/s $= 700$ km/h : cela correspond à la vitesse d'un avion ! On comprend aisément qu'un tel soliton puisse traverser l'océan pacifique extrêmement rapidement. Il ralentira au voisinage des côtes, mais déferlera sur plusieurs centaines de mètres à l'intérieur des terres après que la localisation non-linéaire due à la diminution de profondeur lui ait donné une hauteur considérable.

La majorité des solitons hydrodynamiques serait d'origine sismique [45] comme celui d'Izmit du 17 août 1999. Cependant, l'arrivée brutale en mer d'une quantité plus ou moins importante de produits volcaniques [72] serait l'une des origines possibles de ces solitons par un mécanisme analogue à celui de l'expérience de J.S. Russell présentée dans la figure 1.1. Ainsi 30 000 personnes auraient péri en 1883 à cause du *tsunami* créé par l'éruption du Krakatau en Indonésie dans le détroit de la sonde. Les îles volcaniques de l'arc antillais sont à l'heure actuelle particulièrement surveillées car susceptibles de créer de tels solitons en cas d'effondrement. Les îles voisines, et même les États-Unis, pourraient alors subir de gros dommages.

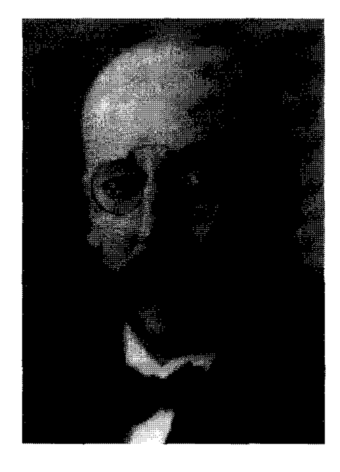


DIEDERIK JOHANNES KORTEWEG (1848-1941), fils d'un juge de la ville d'Hertogenbosch dans le sud des Pays Bas, a entamé sa carrière à l'université technique de Delft.

Il effectua sa thèse sous la direction du futur prix Nobel J.D. Van der Waals, l'un des plus brillants physiciens de cette époque néerlandaise particulièrement remarquable. Sa thèse, intitulée « Sur la propagation d'ondes dans les tubes élastiques », lui permit en 1878 de devenir le premier docteur de l'université d'Amsterdam, à peine habilitée à décerner ce titre. Trois années plus tard, il obtint et occupa pendant quarante années la première chaire de mathématiques de cette université.

Il travailla alors toujours en collaboration avec J.D. Van der Waals, mais aussi avec J.H. van't Hoff, sur des questions de thermodynamique, de mécanique des fluides et de mécanique classique. Il apporta également des contributions remarquées en mathématiques pures, sur les équations algébriques à coefficients

réels ainsi que sur les propriétés des surfaces au voisinage de points singuliers (Gravure université d'Amsterdam, 1906).



C'est avec son étudiant de thèse, GUSTAV DE VRIES, (1866-1934) qu'il confirma que les opinions d'Airy et de Stokes n'étaient pas correctes et qu'il introduisit également cette nouvelle équation [44, 85] qui porte leurs noms. Ils en déterminèrent non seulement les solutions périodiques à l'aide des fonctions elliptiques, mais démontrèrent aussi comment les solitons pouvaient être créés à partir des ondes de grande longueur d'onde. Bien qu'ayant utilisé le qualificatif « très importante » pour cette équation, ils ne réalisèrent pas vraiment la profondeur de leur découverte et ne publièrent plus rien sur le sujet. G. de Vries publia deux articles sur les cyclones puis devint professeur de lycée à Haarlem et se maria à une professeure de littérature et de français (Photographie Famille de Vries).

1.2 Les solutions de l'équation de KdV

Comme toutes les équations non-linéaires, l'équation de KdV est très riche et possède une grande variété de solutions. Examinons quelques-unes d'entre elles, qui sont particulièrement intéressantes.

1.2.1 Solutions à profil constant

Ce sont des solutions qui se propagent avec une vitesse v sans se déformer, c'est-à-dire des solutions du type $\phi(\xi, \tau) = \phi(\xi - v\tau)$. En introduisant, la nouvelle variable $z = \xi - v\tau$, l'équation de KdV (1.3) s'écrit

$$-v\phi_z + 6\phi\phi_z + \phi_{zzz} = 0 \quad , \tag{1.9}$$

(où l'on a noté par un indice une dérivation par rapport à une variable, $\phi_z = \partial\phi/\partial z$), soit

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z}\left(-v\phi + 3\phi^2 + \phi_{zz}\right) = 0 \quad , \tag{1.10}$$

d'où

$$\phi_{zz} + 3\phi^2 - v\phi + c_1 = 0 \quad , \tag{1.11}$$

où c_1 est une constante d'intégration. En multipliant par ϕ_z et en intégrant une seconde fois par rapport à z, on obtient

$$\frac{1}{2}\phi_z^2 + \phi^3 - \frac{1}{2}v\phi^2 + c_1\phi = c_2 \quad , \tag{1.12}$$

où c_2 est une seconde constante d'intégration. Cette équation est formellement analogue à l'équation exprimant la conservation de l'énergie d'une particule de masse unité, dont la position serait repérée par ϕ, le temps noté z, et qui serait soumise à un potentiel

$$V_{\text{eff}}(\phi) = \phi^3 - \frac{1}{2}v\phi^2 + c_1\phi \quad , \tag{1.13}$$

représenté sur les figures 1.7. L'équation (1.12) peut donc s'écrire

$$\frac{1}{2}\phi_z^2 + V_{\text{eff}}(\phi) = c_2 \quad . \tag{1.14}$$

Cette approche faisant intervenir un « pseudo-potentiel » permet d'identifier facilement, à partir de notre expérience de la mécanique, pour quelles valeurs de la vitesse v et des constantes c_1 et c_2 on peut obtenir des solutions bornées en ϕ.

Solution soliton

La solution soliton que nous avons déjà décrite est une solution localisée spatialement, c'est-à-dire que les trois champs ϕ, ϕ_z, ϕ_{zz} tendent vers zéro lorsque $|z|$ tend vers l'infini : cela implique que les constantes d'intégration doivent être prises nulles et l'équation (1.12) se réduit donc à

$$\frac{1}{2}\phi_z^2 + \phi^3 - \frac{1}{2}v\phi^2 = 0 \quad . \tag{1.15}$$

Considérons une particule partant à « l'instant initial » $z = -\infty$ de la position notée 1 (cf. fig 1.7a) correspondant à $\phi = 0$. Le système étant hamiltonien et z correspondant au pseudo-temps, le mouvement se fera à « pseudo-énergie » constante. Il est clair que, si la particule part du côté négatif, on aura une divergence de ϕ, ce qui est évidemment impossible puisque l'on ne considère que les solutions bornées : il n'existe donc pas de solutions solitons de l'équation de KdV avec des valeurs négatives pour ϕ (des dépressions), conformément à ce qui avait été observé par J.S. Russell.

Au contraire, si la particule part du côté positif, elle ira jusqu'au point 2, où ϕ_z s'annulera : elle rebroussera alors chemin pour revenir au point 1 lorsque z tendra vers l'infini. Cette solution correspond par conséquent à la croissance, puis à la décroissance, de la solution soliton de l'équation de KdV. On détermine l'expression complète de la solution en intégrant

$$\mathrm{d}z = \frac{\mathrm{d}\phi}{\sqrt{v\phi^2 - 2\phi^3}} \tag{1.16}$$

à l'aide du changement de variable $\phi = (v \operatorname{sech}^2 u)/2$. On obtient alors la solution

$$\phi = \frac{v}{2}\operatorname{sech}^2\left(\sqrt{\frac{v}{4}}z\right) \quad . \tag{1.17}$$

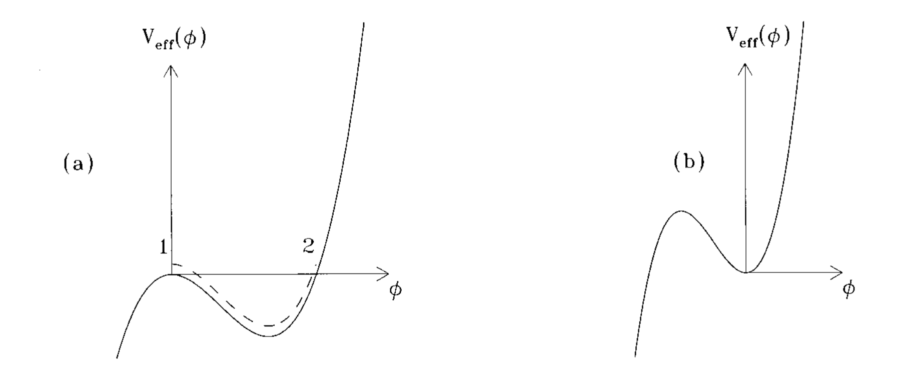


FIG. 1.7 – Allure du potentiel effectif $V_{\text{eff}}(\phi)$ lorsque $v > 0$ (a) et $v < 0$ (b).

En posant $A = v/2$, on retrouve alors l'expression de la solution soliton que nous avions déjà présentée (cf. équation (1.4)). On note que la valeur de ϕ au point 2 correspond à l'amplitude A de la solution qui vérifie $V_{\text{eff}}(A) = 0$, ce qui donne bien la vitesse de propagation $v = 2A$ qui figure dans la solution.

Lorsque la vitesse v est choisie négative, on remarque qu'il n'existe plus de possibilité de « mouvement » borné à énergie constante pour une particule issue de la « position » $\phi = 0$ (cf. fig. 1.7b). Ce comportement différent pour $v > 0$ et $v < 0$ ne correspond cependant pas à une brisure de la symétrie entre x et $-x$ dans le repère du laboratoire. En effet, l'équation de KdV est exprimée dans le repère mobile à la vitesse c_0. La différence entre $v > 0$ et $v < 0$ correspond simplement au fait que les solitons hydrodynamiques sont toujours supersoniques comme l'avait aussi observé J.S. Russell.

Solution générale : ondes cnoïdales

Si l'on ne cherche plus de solutions localisées spatialement, les deux constantes c_1 et c_2 ne sont plus forcément nulles. L'équation

$$\frac{1}{2}\phi_z^2 = c_2 - c_1\phi + \frac{1}{2}v\phi^2 - \phi^3 \tag{1.18}$$

peut encore être résolue analytiquement, en introduisant une nouvelle fonction inconnue $u(z)$ telle que $\phi - \phi_0 = -\alpha\, u(z)^2$, α et ϕ_0 étant deux constantes à déterminer. On peut alors mettre l'équation sous la forme

$$\left(\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}z}\right)^2 = (1 - u^2)(1 - k^2 + k^2u^2) \quad , \tag{1.19}$$

où k est une constante à déterminer. Cette équation différentielle non-linéaire possède comme solutions les fonctions elliptiques de Jacobi qui généralisent les fonctions trigonométriques usuelles [13].



FIG. 1.8 – Onde solitaire se propageant dans la baie de Maalea de l'île de Maui de l'archipel d'Hawaï (Photographie Robert I. Odom, 2003).

La solution physiquement intéressante pour les ondes hydrodynamiques est la solution

$$\phi = \phi_0 - \frac{k^2 q^2}{2} \operatorname{cn}^2\left(\frac{qx}{2}, k\right) \tag{1.20}$$

qui fait intervenir un cosinus elliptique, noté $\operatorname{cn}(x, k)$. Cette famille de solutions à un paramètre k contient la fonction cosinus usuelle lorsque $k = 0$ mais tend vers la fonction sech, lorsque le module k tend vers 1. On retrouve alors la solution soliton présentée précédemment. Pour les valeurs intermédiaires de k, c'est une fonction qui ressemble qualitativement à la fonction $\cos x$, mais qui est moins arrondie vers ses maxima. Cette forme correspond à la forme « pointue » que l'on remarque pour les vagues quand leur amplitude augmente, en particulier près du rivage lorsque la profondeur se réduit et donc lorsque la non-linéarité augmente (cf. fig. 1.9).

1.2.2 Solutions multisolitons

Hormis les solutions à profil constant, l'équation de KdV possède une infinité d'autres solutions que l'on appelle solutions multisolitons. Cette dénomination vient du fait que, lorsque $|t|$ tend vers l'infini, elles tendent vers une superposition de plusieurs solitons séparés les uns des autres. L'évolution temporelle de ces solutions décrit alors les phénomènes d'interaction entre solitons.

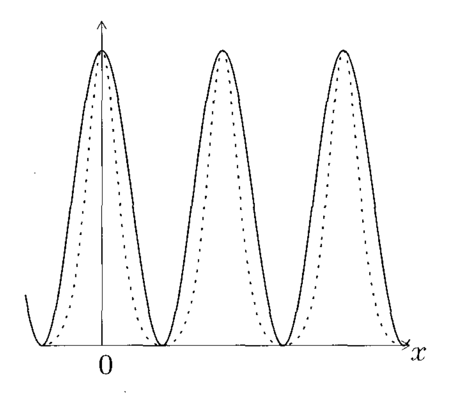


FIG. 1.9 – Allure de la fonction $\mathrm{cn}^2(x,k)$ pour $k = 0$ (ligne continue) et $k = 0{,}98$ (pointillés).

Nous verrons ultérieurement (cf. chap. 7) une façon systématique de construire ces solutions, mais considérons d'abord l'une d'entre elles plus particulièrement intéressante, la solution à deux solitons :

$$\phi = \frac{2(K_1^2 - K_2^2)}{[K_1 \coth X_1 - K_2 \tanh X_2]^2}\left(\frac{K_1^2}{\sinh^2 X_1} + \frac{K_2^2}{\cosh^2 X_2}\right) \quad , \tag{1.21}$$

où l'on a défini $X_1 = K_1(\xi - 4K_1^2\tau)$ et $X_2 = K_2(\xi - 4K_2^2\tau)$. Supposons pour fixer les idées que $K_1 > K_2$ et considérons la solution aux deux limites $\tau \to \pm\infty$.

Notons ϕ_2 la solution au voisinage de $\xi = 4K_2^2\tau$. Comme $K_1 > K_2$, lorsque l'on considère la limite pour τ tendant vers $-\infty$, X_1 est beaucoup plus grand que 1. Cela signifie que $\sinh X_1 \gg 1$ et $\coth X_1 \simeq 1$. Par conséquent, en posant $\tanh\Delta = K_2/K_1$, on obtient après quelques calculs

$$\phi_2 \simeq 2(1 - \tanh^2\Delta)\frac{K_2^2}{\left(\cosh^2 X_2 - \tanh\Delta \sinh X_2\right)^2} = \frac{2K_2^2}{\cosh^2(X_2 - \Delta)} \cdot \tag{1.22}$$

Ainsi, au voisinage de $\xi = 4K_2^2\tau$, lorsque $\tau \to -\infty$, la solution est identique à une seule solution soliton de KdV, dont l'amplitude serait donnée par $A = 2K_2^2$. De même, au voisinage de $\xi = 4K_1^2\tau$, la solution correspond à

$$\phi_1 \simeq 2K_1^2\,\mathrm{sech}^2(X_1 + \Delta') \quad . \tag{1.23}$$

Donc, lorsque l'on considère la limite $\tau \to -\infty$, la solution a l'allure de deux solitons séparés, l'un d'amplitude $2K_1^2$ et de vitesse $4K_1^2$, l'autre d'amplitude $2K_2^2$ et de vitesse $4K_2^2 < 4K_1^2$.

Lorsque $\tau \to +\infty$, une analyse en tout point identique donne à nouveau une solution où les deux solitons sont séparés mais le soliton 1, ayant

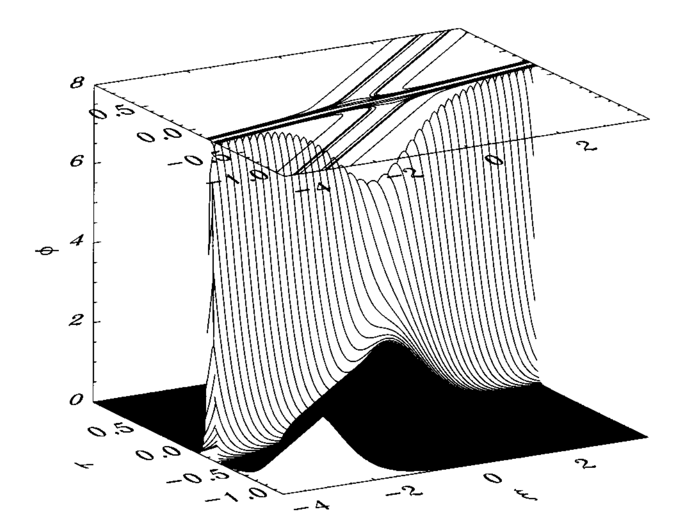


FIG. 1.10 – Représentation de la dynamique de la solution exacte (1.21) pour $K_1 = 2$ et $K_2 = 1$ dans le plan ξ, τ. Dans le domaine des plus grandes valeurs négatives de ξ et τ, on distingue les deux pulses entrant en collision qui sont bien séparés, le premier d'amplitude égale à 8 et le second, plus petit, d'amplitude égale à 2. Le plus grand parcourt tout le domaine représenté pour ξ (de -4 à $+4$) avec seulement une faible variation de τ car il est le plus rapide. Après la collision, le pulse le plus petit est masqué par l'autre, mais il est toujours présent comme l'indique la vue de dessus qui représente des contours où ϕ garde une valeur constante. Elle permet de visualiser la position des deux pulses en fonction du temps et de se rendre compte du décalage dû à la collision.

dépassé l'autre. Au voisinage de $\xi = 4K_2^2\tau$ la solution est maintenant $\phi_2 \simeq 2K_2^2 \operatorname{sech}^2(X_2 + \Delta)$ et au voisinage de $\xi = 4K_1^2\tau$ elle vaut $\phi_1 \simeq 2K_1^2 \operatorname{sech}^2(X_1 - \Delta')$.

Chacun des deux solitons a conservé sa vitesse, mais cette analyse attentive montre cependant que les deux solutions ont interagi. L'équation étant non-linéaire, la collision des deux solitons ne correspond en effet *pas* à une simple superposition. Cet effet est clairement mis en évidence sur la figure 1.10 puisqu'au moment de la collision, l'amplitude observée est inférieure à celle du soliton 1.

La forme asymptotique des solutions montre également que, lors de la collision, les deux solitons subissent un déphasage qui apparaît clairement sur l'évolution en contour de la figure 1.10. Pour $\tau \to -\infty$, en remplaçant X_2 par sa valeur dans l'expression (1.22), on note que le soliton 2 s'exprime en fonction de sa position $4K_2\tau + \Delta/K_2$ alors que le calcul pour $\tau \to +\infty$, montre qu'il s'exprime en fonction de sa position $4K_2\tau - \Delta/K_2$. À cause de la collision, le soliton 2 s'est donc retardé de $2\Delta/K_2$ par rapport à la position

qu'il aurait eue s'il n'était pas entré en collision avec le soliton 1. De manière similaire, il est facile de montrer que le soliton le plus grand est en revanche avancé.

La photographie 1.11, prise au bord de la mer, montre la collision de deux pulses sur un rivage où la profondeur de l'eau est faible. Les paramètres précis de cet événement ne sont pas connus, mais cette photographie met clairement en évidence que la forme des deux ondes solitaires est préservée après la collision ; on peut également distinguer le décalage dû à la collision bien qu'il soit faible. L'accord qualitatif entre les figures 1.10 et 1.11 est saisissant.

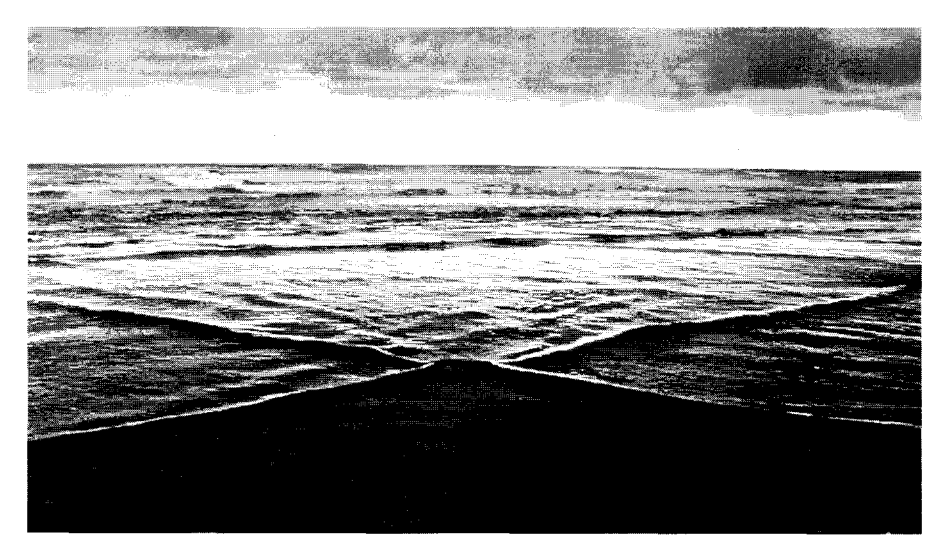


FIG. 1.11 – Collision de deux solitons de faible amplitude photographiée sur une plage de l'état d'Oregon sur la côte ouest des États-Unis (Photographie Terry Toedtemeier, 1978).

1.3 Relations de conservation

Introduisons un lagrangien L pour un champ $u(\xi, \tau)$ par la relation

$$L = \int \mathrm{d}\xi \; \mathcal{L} = \int \mathrm{d}\xi \; \frac{1}{2} \left[u_\xi u_\tau + 2u_\xi^3 - u_{\xi\xi}^2 \right] \quad , \tag{1.24}$$

où $\mathcal{L}$ est le lagrangien par unité de longueur. Si on écrit l'équation de Lagrange des milieux continus (cf. appendice B pour un rappel) pour le champ u

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\tau}\left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial u_\tau}\right) + \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial u_\xi}\right) - \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\xi^2}\left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial u_{\xi\xi}}\right) - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial u} = 0 \quad , \tag{1.25}$$

on obtient

$$u_{\xi\tau} + 6u_\xi \, u_{\xi\xi} + u_{\xi\xi\xi\xi} = 0 \quad , \tag{1.26}$$

et on note que, si l'on pose $\phi = u_\xi$, on obtient l'équation de KdV (1.3). De la même façon, lorsque l'on établit l'équation de KdV pour différents systèmes physiques, la variable qui apparaît dans l'équation (ici ϕ) correspond souvent à la dérivée spatiale d'un champ physique.

Il est intéressant de disposer d'un lagrangien conduisant à l'équation de KdV car il peut être utilisé de façon systématique pour établir des lois de conservation pour un système décrit par cette équation [5]. On peut ainsi établir un petit nombre de lois de conservation, mais nous verrons dans la partie B (Méthodes mathématiques d'étude des solitons) que le modèle de KdV est bien plus riche que cela : il possède une infinité de lois de conservation.

Certaines de ces lois apparaissent clairement sur les solutions à un ou deux solitons ; ainsi la quantité

$$M = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}\xi \; \phi(\xi, \tau) \quad , \tag{1.27}$$

que l'on appelle « masse » *de l'onde*, est une constante du mouvement. Si cette loi de conservation est parfaitement évidente pour la solution à un soliton puisque la solution se propage sans déformation, elle l'est beaucoup moins pour les solutions à deux solitons auxquelles elle s'applique cependant, comme à toutes les solutions de l'équation de KdV.

Pour un champ obéissant à l'équation (1.3), on a également l'égalité :

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\tau} \int_{-\infty}^{+\infty} \xi\phi(\xi,\tau)\mathrm{d}\xi = 3 \int_{-\infty}^{+\infty} \phi^2(\xi,\tau)\mathrm{d}\xi = \mathrm{cste} \quad . \tag{1.28}$$

En utilisant à nouveau la notion de « masse » de l'onde, si ϕ correspond à une distribution de masse, $\int \xi\phi \, \mathrm{d}\xi$ correspond alors à la *position du centre de masse*. La loi de conservation (1.28) exprime par conséquent que le mouvement du « centre de masse » est uniforme. C'est à nouveau évident pour la solution à un soliton, mais également valable pour toute solution de KdV et en particulier pour la solution à deux solitons.

Après avoir aperçu quelques propriétés *mathématiques* de l'équation de KdV et de ses solutions, nous allons montrer maintenant que l'équation de KdV s'applique à de nombreux *systèmes physiques* faiblement dispersifs et faiblement non-linéaires.

1.4 Lignes électriques non-linéaires

1.4.1 Description du problème physique

C'est un exemple intéressant car, non seulement sa compréhension ne requiert que des concepts physiques élémentaires, mais il se prête en outre facilement à des réalisations expérimentales. Comme nous l'avons déjà vu, pour

avoir propagation de solitons, il faut que le système comporte simultanément dispersion et non-linéarité. La dispersion est obtenue en utilisant une ligne à composants discrets alors que la non-linéarité est obtenue en utilisant des composants non-linéaires. On peut par exemple constituer une ligne passive, c'est-à-dire sans amplification, en utilisant des diodes varicap, qui se comportent dans le circuit comme des capacités non-linéaires (cf. fig. 1.12).

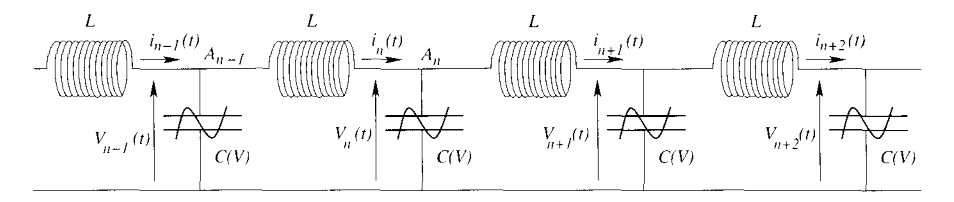


FIG. 1.12 – Schéma de la ligne électrique non-linéaire constituée d'inductances et de diodes varicap représentées par une capacité non-linéaire $C(V)$.

Les paramètres de la cellule n sont :
- le courant i_n dans l'inductance,
- la tension V_n aux bornes de la capacité,
- la charge Q_n de la capacité.

La loi des nœuds appliquée au point A_n donne tout d'abord

$$i_n = \frac{\mathrm{d}Q_n}{\mathrm{d}t} + i_{n+1} \quad . \tag{1.29}$$

La différence de potentiel entre les points A_n et A_{n-1} donne ensuite

$$V_{n-1} - V_n = L\frac{\mathrm{d}i_n}{\mathrm{d}t} \quad . \tag{1.30}$$

La combinaison des deux équations conduit donc à

$$\frac{\mathrm{d}^2Q_n}{\mathrm{d}t^2} = \frac{1}{L}\left[(V_{n-1} - V_n) - (V_n - V_{n+1})\right] \quad . \tag{1.31}$$

La capacité de la diode varicap que l'on utilise dépend de la tension V selon une loi représentée schématiquement par la figure 1.13. En pratique on utilise la diode varicap pour une tension V variant peu autour d'une valeur de polarisation V_0 qui fixe le point de fonctionnement de la diode et on notera $V(t) = V_0 + v(t)$. La valeur typique de la tension de polarisation est $V_0 = 2$ volts et l'écart v est inférieur au volt alors que le domaine de tension représenté sur la figure 1.13 s'étend sur une dizaine de volts. On approche donc tout simplement la loi $C(V)$ par son développement au premier ordre autour de la tension de polarisation :

$$C(V) = C(V_0)(1 - a_1 v) \quad . \tag{1.32}$$

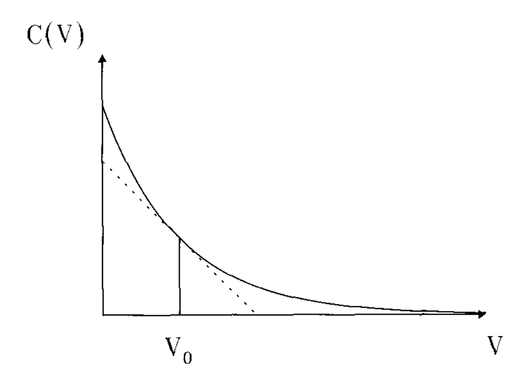


FIG. 1.13 Allure schématique de la variation de la capacité $C(V)$ d'une diode varicap en fonction de la tension V à ses bornes.

À partir de la définition de la capacité dynamique $C(V) = \mathrm{d}Q/\mathrm{d}V$, la charge de la capacité sous la tension $V_0 + v$ a pour expression

$$Q = \int_0^{V_0} C(V)\mathrm{d}V + \int_{v=0}^{v} C(V_0)(1 - a_1 u)\mathrm{d}u \tag{1.33}$$

$$= Q_0 + C(V_0)\left[v - \frac{a_1}{2}v^2\right] \tag{1.34}$$

que l'on notera

$$Q = Q_0 + C_0(v - av^2) \quad , \quad \text{avec} \quad a = \frac{a_1}{2} \text{ et } C_0 = C(V_0) \quad . \tag{1.35}$$

En combinant cette expression de la charge avec l'équation (1.31), on obtient pour l'écart v_n à la polarisation V_0 de la cellule n l'équation

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}(v_n - av_n^2) = \frac{1}{LC_0}(v_{n+1} + v_{n-1} - 2v_n) \quad . \tag{1.36}$$

Pour une chaîne de N cellules identiques, on obtient un ensemble de N équations différentielles non-linéaires couplées que l'on ne sait pas résoudre exactement. On doit donc recourir à des approximations dont il faudra vérifier la validité *a posteriori*.

1.4.2 Approximation linéaire. Relation de dispersion

Pour les faibles tensions v, on peut utiliser une approximation linéaire comme on le fait (trop ?) souvent en physique. Cette approximation valable lorsque $av_n \ll 1$, conduit à l'équation

$$\frac{\mathrm{d}^2 v_n}{\mathrm{d}t^2} = \frac{1}{LC_0}(v_{n+1} + v_{n-1} - 2v_n) \tag{1.37}$$

qui possède comme solutions les ondes planes $v_n = Ae^{i(qn-\omega t)}$ si ω et q sont liés par la relation de dispersion $\omega = \pm 2c_0 \sin(q/2)$ où l'on a défini $c_0 = 1/\sqrt{LC_0}$. La pulsation $\omega_0 = 2c_0$ est appelée la pulsation de coupure puisque les pulsations supérieures ne peuvent se propager dans le réseau électrique comme le montre la figure 1.14.

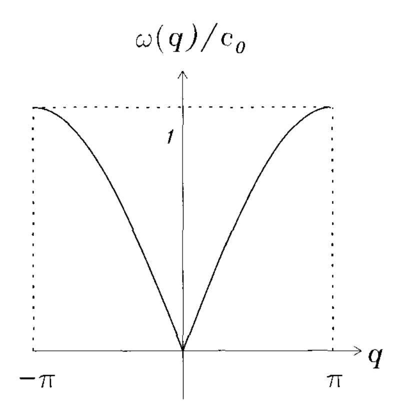


FIG. 1.14 – Relation de dispersion des ondes planes qui peuvent se propager dans un réseau électrique décrit par l'équation (1.37).

La vitesse de phase $v_\varphi = \omega/q$ déduite de la relation de dispersion dépend du vecteur d'onde q. Le système est par conséquent *dispersif.* Cependant, comme dans la limite des grandes longueurs d'ondes la vitesse de phase tend vers la constante c_0, l'approximation linéaire montre que la chaîne électrique constitue un milieu faiblement dispersif pour les grandes longueurs d'ondes. Dans les cas où l'amplitude est trop importante pour que l'on puisse négliger av devant 1, on aura en outre une faible non-linéarité. Tous les ingrédients semblent donc réunis pour que l'on puisse obtenir l'équation de KdV. Nous allons voir que c'est bien le cas mais que le chemin qui y conduit comporte plusieurs étapes.

1.4.3 L'équation non-linéaire dans la limite des milieux continus

Le système d'équations différentielles non-linéaires couplées (1.36) n'est pas soluble exactement, mais on peut obtenir une solution approchée qui conserve la non-linéarité en se ramenant à une équation aux dérivées partielles. Pour cela, on suppose que l'écart de tension v_n varie peu d'un site n à son voisin (cf. fig. 1.15). On remplace alors l'ensemble des valeurs discrètes $v_n(t)$ par le champ $v(x,t)$ de telle manière que $v_n(t) = v(x = n, t)$ où x mesure la longueur le long de la chaîne mesurée en nombre de cellules ; c'est donc une variable sans dimension. Faire l'hypothèse de variation spatiale lente de $v(x,t)$ revient à supposer que les dérivées de v_n sont faibles. On utilise alors

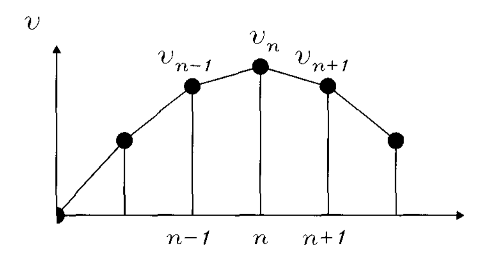


FIG. 1.15 – Variation des écarts de tension v_n à la polarisation V_0.

le développement de Taylor autour du point $x = n$

$$v_{n\pm1}(t) = v(n \pm 1, t) = v(n,t) \pm \frac{\partial v}{\partial x}(n,t) + \frac{1}{2}\frac{\partial^2 v}{\partial x^2}(n,t) \pm \frac{1}{6}\frac{\partial^3 v}{\partial x^3}(n,t) + \frac{1}{24}\frac{\partial^4 v}{\partial x^4}(n,t) + \ldots \quad . \tag{1.38}$$

En tronquant le développement à l'ordre 4 et en introduisant à nouveau la quantité $c_0 = 1/\sqrt{LC_0}$, le système d'équations (1.36) se réduit grâce à cette approximation, appelée approximation des milieux continus, à l'équation aux dérivées partielles

$$\frac{\partial^2 v}{\partial t^2} - a\frac{\partial^2 v^2}{\partial t^2} = c_0^2\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{c_0^2}{12}\frac{\partial^4 v}{\partial x^4} \quad . \tag{1.39}$$

La difficulté dans une telle approche est de déterminer à quel ordre on doit limiter le développement. On s'efforce de choisir la forme la plus simple possible (donc l'ordre le plus bas possible) en veillant à décrire toutes les propriétés physiques importantes du système. Dans ce cas particulier il est essentiel de poursuivre le développement au moins jusqu'à l'ordre 4 pour conserver un système dispersif. Il est facile de le vérifier en considérant la version linéarisée de l'équation (1.39). En cherchant des solutions en ondes planes, $v = A\exp[i(qx - \omega t)]$, on obtient la relation de dispersion

$$\omega^2 = c_0^2(q^2 - q^4/12) + \mathcal{O}(q^6) \tag{1.40}$$

qui correspond au développement à faible q de la relation de dispersion exacte obtenue précédemment $\omega^2 = 4c_0^2\sin^2(q/2)$. L'équation (1.39) linéarisée conduit donc bien à la relation de dispersion que l'on pouvait attendre puisque l'approximation des milieux continus revient à ne considérer que des fonctions variant lentement spatialement, dont les composantes de Fourier spatiales ont de grandes longueurs d'ondes, c'est-à-dire un faible vecteur d'onde q. Si l'on avait tronqué le développement à l'ordre 2 seulement, l'approximation aurait été trop sévère car elle aurait conduit à la relation de dispersion $\omega = c_0 q$ correspondant à un milieu *non dispersif*. Une caractéristique essentielle du système aurait donc été négligée.

La troncature du développement de Taylor à l'ordre 4 deviendrait inacceptable si l'on cherchait des solutions variant rapidement d'un point à son voisin. En effet, dans une décomposition de Fourier ces solutions donneraient des contributions à grands vecteurs d'ondes q pour lesquelles le développement précédent de la pulsation $\omega(q)$ donnerait des valeurs négatives, ce qui correspond à des instabilités.

L'équation (1.39) est connue sous le nom d'équation de Boussinesq modifiée, ou même « bad Boussinesq » en raison de sa relation de dispersion qui peut donner des ondes planes instables. Elle ressemble beaucoup à celle obtenue par Boussinesq en 1895 pour les ondes hydrodynamiques en eau peu profonde, mais il existe une différence importante qui se situe dans le terme non-linéaire qui fait intervenir ici une dérivée *temporelle* et non spatiale.

1.4.4 Les solutions quasi-solitons de la chaîne électrique

Contrairement à l'équation de KdV, l'équation de Boussinesq modifiée ne correspond pas à un système totalement intégrable ayant des solutions solitons exactes. Elle a cependant une solution en onde solitaire (ou quasi-soliton) que l'on peut obtenir en cherchant des solutions à profil constant comme nous l'avons fait pour l'équation de KdV. On obtient une solution qui correspond à la propagation d'une impulsion de tension à vitesse constante c supérieure à c_0 :

$$v(n,t) = \frac{3}{2a}\frac{(c^2 - c_0^2)}{c^2}\,\mathrm{sech}^2\left[\frac{\sqrt{3(c^2 - c_0^2)}}{c_0}(n - ct)\right] \quad . \tag{1.41}$$

L'étude de la relation de dispersion ayant montré que c_0 correspondait à la vitesse de propagation des ondes linéaires de grande longueur d'onde dans la chaîne, on remarque que l'on retrouve une caractéristique des solutions de l'équation de KdV. On note également que l'amplitude de l'impulsion de tension, $A = (3/2a)(c^2 - c_0^2)/c^2$, croît avec la vitesse $c > c_0$. Enfin, comme le signe de a fixe toujours celui de la solution et qu'il est positif pour une diode varicap, seules les tensions positives auront un comportement de type onde solitaire ce qui est encore analogue au cas des solutions de l'équation de KdV.

Si l'on écrit la solution sous la forme $v(n,t) = A\,\mathrm{sech}^2[(n - ct)/\ell]$, on note que la quantité $\ell = c_0/\sqrt{3(c^2 - c_0^2)}$ détermine la largeur de l'impulsion de tension. L'approximation des milieux continus, qui exige que $v(n,t)$ varie peu d'un site au suivant, ne sera valable que pour $\ell \gg 1$. Si on considère par exemple des solutions se propageant à la vitesse $c = 1{,}05\, c_0$, on obtient une largeur $\ell = 1{,}83$ pour laquelle l'approximation des milieux continus devient très discutable. Une simulation numérique de la chaîne discrète montre pourtant que la solution analytique dans la limite des milieux continus reste encore une bonne solution de la chaîne discrète. C'est une situation que l'on rencontre souvent quand on travaille avec les équations ayant des solutions solitons

ou ondes solitaires. Ces équations sont remarquablement « tolérantes » aux approximations !

La condition $\ell \gg 1$ est vérifiée quand c reste assez voisin de c_0, ce qui correspond à des amplitudes A qui restent modérées. Comme la non-linéarité de l'équation de départ (1.36) était $v(1 - av)$, la validité de l'approximation des milieux continus pour la ligne électrique correspond au cas des faibles non-linéarités.

Bien que cette équation de Boussinesq ne soit pas totalement intégrable, on connaît grâce aux travaux d'Hirota certaines solutions multi-solitons. Il a même été montré que la collision de deux quasi-solitons donnés par l'équation (1.41) préserve leur forme et leur vitesse à un déphasage près, en tout point comme pour l'équation de KdV, mais on a de plus la possibilité de le vérifier très facilement *expérimentalement* sur une ligne électrique.

1.4.5 La limite KdV pour la chaîne électrique

L'équation de Boussinesq modifiée décrit bien les propriétés de la chaîne électrique, mais elle est beaucoup moins facile à utiliser en pratique que l'équation de KdV car l'on dispose de beaucoup moins d'outils mathématiques. Nous verrons par exemple que, pour l'équation de KdV, il existe une méthode *systématique* pour prévoir l'évolution temporelle de n'importe quelle condition initiale.

Cependant, puisqu'on a vu que l'équation de Boussinesq décrit des systèmes faiblement dispersifs et faiblement non-linéaires comme l'équation de KdV, il est naturel de rechercher une transformation de la première équation vers la seconde ; cela est possible au prix d'une approximation supplémentaire que nous allons présenter maintenant.

Pour fixer l'échelle de la non-linéarité de l'équation de Boussinesq, on introduit un paramètre ε, supposé de l'ordre de grandeur de la variation de tension v, donc faible. En posant $v = \varepsilon U$, l'équation (1.39) s'écrit

$$\frac{\partial^2 U}{\partial t^2} - c_0^2 \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} - \frac{c_0^2}{12} \frac{\partial^4 U}{\partial x^4} - \varepsilon a \frac{\partial^2 U^2}{\partial t^2} = 0 \quad . \tag{1.42}$$

L'étape suivante est d'utiliser des changements de variables appropriés pour simplifier l'équation. On peut comprendre leur justification en considérant la relation de dispersion

$$\omega = c_0(q - q^3/24) + \mathcal{O}(q^5) \quad . \tag{1.43}$$

L'argument $\omega t - qx$ de l'exponentielle qui apparaît dans les solutions linéarisées en ondes planes peut par conséquent se réécrire

$$\omega t - qx = c_0(q - q^3/24)t - qx \quad . \tag{1.44}$$

Comme nous cherchons des solutions correspondant à de grandes longueurs d'ondes, c'est-à-dire des vecteurs d'ondes faibles, il est logique d'introduire

une nouvelle mesure K du vecteur d'onde, sous la forme $q \equiv K\varepsilon^\alpha$. Le choix de la puissance α n'est pas fixé *a priori* ; il sera déterminé *a posteriori* pour que la non-linéarité et la dispersion donnent des contributions au même ordre en ε. L'expression (1.44) se réécrit donc

$$\omega t - qx = c_0(K\varepsilon^\alpha - (K\varepsilon^\alpha)^3/24)\,t - K\varepsilon^\alpha x \tag{1.45}$$

$$= \varepsilon^\alpha K(c_0 t - x) - \varepsilon^{3\alpha} K^3 t/24 \quad . \tag{1.46}$$

Après avoir regroupé les termes par puissance de ε, il apparaît naturel d'introduire les variables

$$\xi = \varepsilon^\alpha (x - c_0 t) \quad \text{et} \quad \tau = \varepsilon^{3\alpha} t \quad , \tag{1.47}$$

de manière à obtenir l'expression $\omega t - qx = -K\xi - K^3\tau/24$. Avec ces nouvelles variables, si on introduit $\Omega(K) = -K^3/24$, l'expression $\omega t - qx$ deviendra $\Omega\tau - K\xi$, c'est-à-dire qu'elle reprendra une forme analogue à sa forme initiale. On a cependant progressé car, d'une part, on a explicitement traduit le fait que l'on cherche une équation adaptée à des solutions à variation spatiale lente en choisissant l'expression du vecteur d'onde K, et d'autre part, cela nous a conduit à passer dans le repère mobile à la vitesse c_0 en introduisant ξ. Or, on se souvient qu'en hydrodynamique, l'équation de KdV apparaissait aussi sous sa forme simple en passant dans le repère mobile à la vitesse c_0 qui, comme pour la ligne électrique, était la vitesse de phase des ondes linéaires de grande longueur d'onde.

En l'absence de dispersion et de non-linéarité, un signal de forme quelconque se propagerait à la vitesse c_0 et apparaîtrait donc comme *stationnaire* dans le repère mobile. En présence de faible dispersion et de faible non-linéarité, il est naturel de prévoir une déformation lente du signal dans le repère mobile. C'est ce que traduit mathématiquement la définition de la nouvelle variable temporelle τ.

En exprimant l'équation (1.42) dans les variables ξ et τ, on obtient

$$\left(\varepsilon^{6\alpha}\partial_{\tau\tau} - 2c_0\varepsilon^{4\alpha}\partial_{\tau\xi} + c_0^2\varepsilon^{2\alpha}\partial_{\xi\xi}\right)(U - a\varepsilon U^2) - c_0^2\varepsilon^{2\alpha}U_{\xi\xi} - \frac{c_0^2\varepsilon^{4\alpha}}{12}U_{\xi\xi\xi\xi} = 0 \tag{1.48}$$

ou, en séparant les termes dominants,

$$\varepsilon^{2\alpha}\underbrace{\left(c_0^2 U_{\xi\xi} - c_0^2 U_{\xi\xi}\right)}_{=0} - \varepsilon^{4\alpha}\left(2c_0 U_{\tau\xi} + \frac{c_0^2}{12}U_{\xi\xi\xi\xi}\right) - \varepsilon^{2\alpha+1}ac_0^2(U^2)_{\xi\xi}$$
$$= \mathcal{O}\left(\varepsilon^{6\alpha}, \varepsilon^{4\alpha+1}\right) \quad . \tag{1.49}$$

On constate que le choix $\alpha = 1/2$ permet de faire intervenir les termes dominants de la non-linéarité et la dispersion au même ordre, ε^2 et que, à cet ordre, on obtient l'équation

$$-c_0\left(2U_\tau + \frac{c_0}{12}U_{\xi\xi\xi} + ac_0(U^2)_\xi\right)_\xi = 0 \quad . \tag{1.50}$$

C'est donc un choix judicieux lorsque l'on s'intéresse à des solutions de type soliton puisque l'on cherche le cas où dispersion et non-linéarité se compensent.

L'équation (1.50) peut être intégrée une fois directement pour donner

$$\frac{\partial U}{\partial \tau} + ac_0\, U \frac{\partial U}{\partial \xi} + \frac{c_0}{24} \frac{\partial^3 U}{\partial \xi^3} = 0 \quad . \tag{1.51}$$

La constante d'intégration a été prise nulle dans la mesure où l'on s'intéresse aux solutions localisées spatialement. C'est une équation qui se réduit à l'équation de KdV (1.3) en introduisant des facteurs d'échelles sur le temps et l'amplitude $\tau = c_0 T/24$ et $\phi = 4aU$. Sa solution

$$\phi = A\,\mathrm{sech}^2 \left[\sqrt{\frac{A}{2}}\,(\xi - 2A\tau) \right] \tag{1.52}$$

confirme que si l'amplitude de l'onde est d'ordre ε, le terme spatial est bien en $\varepsilon^{1/2}$ alors que le terme temporel est en $\varepsilon^{3/2}$; le résultat est donc bien cohérent avec les échelles spatiales et temporelles choisies en (1.47).

Comme le chemin de Boussinesq à KdV peut paraître tortueux, il est important de vérifier que les résultats que l'on obtient à partir de l'approximation de KdV sont convenables. Si l'on considère une solution soliton se propageant à la vitesse c proche de c_0 de telle manière que l'on puisse poser $c = c_0(1+\alpha)$, où $\alpha \ll 1$, la comparaison des solutions des deux équations montre qu'elles sont identiques au premier ordre en α. Comme nous avions vu lors de l'étude de l'équation de Boussinesq que la vitesse $c = 1{,}05\ c_0$ était déjà à la limite de validité de cette équation, on conclut que, si on reste dans le domaine de validité de l'équation de Boussinesq, ce qui impose de se limiter à $\alpha \leq 0{,}05$, les deux équations Boussinesq et KdV donnent des résultats identiques à quelques pour cent près. L'erreur que l'on commet en passant à une description de type KdV est de l'ordre de grandeur de l'erreur expérimentale lors des mesures sur la chaîne électrique, mais le gain est important car on dispose des outils mathématiques qu'apporte la théorie de KdV. Il justifie tout à fait l'utilisation de cette approximation.

1.5 Ondes de pression sanguine

Nous allons présenter maintenant un exemple non classique dans lequel on peut obtenir [120, 121] l'équation de KdV. Bien qu'elle ne représente certainement qu'une approximation assez grossière du phénomène, elle permet néanmoins de répondre à une question simple : pourquoi peut-on prendre le pouls au poignet ou à la cheville ? Le cœur envoie une impulsion de pression dans les artères. Celle-ci se propage le long des artères en déformant localement l'artère et c'est cette déformation que l'on sent quand on prend le pouls. Il est remarquable qu'elle puisse se propager jusqu'aux extrémités des

membres sans se disperser notablement. Cela peut s'interpréter par un équilibre entre la non-linéarité provenant de l'hydrodynamique du flux sanguin et la dispersion liée à l'élasticité de la paroi de l'artère comme nous allons le voir sur un modèle simple.

Un petit segment d'artère de longueur ℓ, peut être modélisé par un anneau élastique de rayon r_0 au repos et d'épaisseur h (cf. fig. 1.16). La dynamique d'évolution de son rayon r est régie, non seulement par les forces de pression, mais également par les forces de tension à l'intérieur de l'anneau que nous allons déterminer séparément.

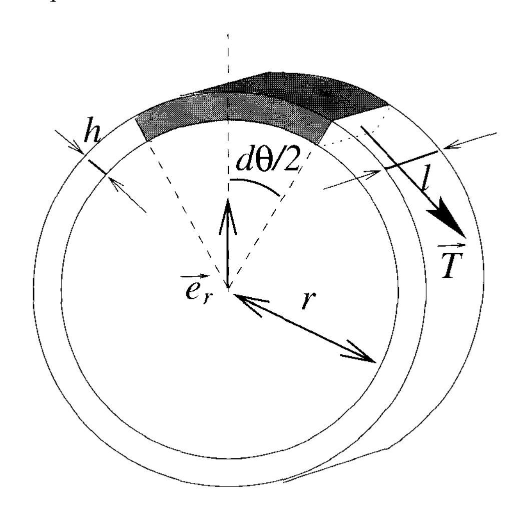


FIG. 1.16 – Représentation schématique d'un petit segment d'artère constituant un anneau de longueur ℓ dans la direction de l'artère, et d'épaisseur h.

La résultante des forces de *pression* subie par une petite portion d'anneau (marquée en grisé fig. 1.16), d'angle d'ouverture $\mathrm{d}\theta$, est dirigée selon le vecteur radial $\vec{e}_r$ et peut s'écrire

$$\mathrm{d}\overrightarrow{f_p} = p\; r\mathrm{d}\theta\, \ell\; \vec{e}_r \quad , \tag{1.53}$$

où p est la pression sanguine au niveau de l'anneau, ou plus exactement, la surpression par rapport à la pression atmosphérique qui règne dans les tissus entourant l'artère.

Lorsque le rayon de l'anneau passe de sa valeur d'équilibre r_0 à une valeur r, l'allongement relatif de la portion d'anneau est $(r\mathrm{d}\theta - r_0\mathrm{d}\theta)/r_0\mathrm{d}\theta$. Les contraintes élastiques internes à l'anneau sont responsables de forces $\vec{T}$ exercées par le reste de l'anneau aux deux extrémités de la petite portion que nous étudions. Si l'on note E le module d'Young du matériau, la tension T est donnée par

$$\frac{r\mathrm{d}\theta - r_0\mathrm{d}\theta}{r_0\mathrm{d}\theta} = \frac{1}{E}\frac{T}{\ell h} \tag{1.54}$$

puisque ℓh est l'aire de la section du matériau qui constitue l'anneau sur laquelle s'exerce T. La résultante radiale de ces forces de *tension* est donc

$$\mathrm{d}\overrightarrow{f_T} = -2T \sin \frac{\mathrm{d}\theta}{2}\, \vec{e}_r \simeq -T\mathrm{d}\theta\, \vec{e}_r = -E\ell h \frac{r - r_0}{r_0} \mathrm{d}\theta\, \vec{e}_r \quad . \tag{1.55}$$

En écrivant la relation fondamentale de la dynamique pour la petite portion d'anneau en projection sur le vecteur radial $\vec{e}_r$, on obtient

$$\mathrm{d}m\, \frac{\partial^2 r}{\partial t^2} = \mathrm{d}f_p + \mathrm{d}f_T \quad , \tag{1.56}$$

où la masse de la portion d'anneau est $\mathrm{d}m = \rho_0 \ell h r_0 \mathrm{d}\theta$, si l'on note ρ_0 la masse volumique des tissus de l'artère. Après simplifications, on obtient

$$\rho_0 h r_0 \frac{\partial^2 r}{\partial t^2} = p\, r - Eh \frac{r - r_0}{r_0} \quad . \tag{1.57}$$

Pour relier les déformations de l'artère aux variations du flux sanguin qu'elle transporte, il est intéressant d'introduire la section du tube $A = \pi r^2$, dont les variations temporelles sont

$$\frac{\partial^2 A}{\partial t^2} = 2\pi r \frac{\partial^2 r}{\partial t^2} + 2\pi \left(\frac{\partial r}{\partial t}\right)^2 \simeq 2\pi r \frac{\partial^2 r}{\partial t^2} \tag{1.58}$$

en ne conservant que la partie linéaire, compte tenu des faibles vitesses du déplacement radial. D'autre part, puisque les variations de r sont faibles, on a

$$A - \pi r_0^2 = \pi(r + r_0)(r - r_0) \simeq 2\pi r_0 (r - r_0) \quad , \tag{1.59}$$

ce qui suggère de réécrire l'équation (1.57) de la manière suivante

$$2\pi r_0 \frac{\partial^2 r}{\partial t^2} \rho_0 h = 2\pi p\, r_0 + 2\pi \frac{r - r_0}{r_0} \left[p r_0 - hE\right] \quad . \tag{1.60}$$

C'est-à-dire après division par $\rho_0 h$,

$$2\pi r_0 \frac{\partial^2 r}{\partial t^2} = \frac{2\pi p\, r_0}{\rho_0 h} - E 2\pi \frac{r - r_0}{\rho_0 r_0} \tag{1.61}$$

en faisant l'approximation $p r_0 \ll hE$; celle-ci est justifiée pour une artère puisque les valeurs typiques [120] sont $p \simeq 20$ mm Hg (correspondant à une « tension sanguine » de 20, qui est déjà élevée), $r_0 \in [2, 10]$ mm, $h \simeq 0{,}1\, r_0$, $E \in [20, 130]$ N/cm^2. On obtient finalement

$$\frac{\partial^2 A}{\partial t^2} = \frac{2\pi p\, r_0}{\rho_0 h} - \frac{E}{\rho_0 r_0^2}(A - \pi r_0^2) \quad . \tag{1.62}$$

Il faut évidemment compléter cette équation provenant de l'élasticité de la paroi par les équations hydrodynamiques pour le flux sanguin. La viscosité

qui se traduit par un amortissement de l'impulsion initiale conduirait à une perturbation de l'équation finale mais nous allons la négliger ici pour simplifier. Nous verrons ensuite comment elle est compensée dans la circulation sanguine.

En notant que seule la composante le long de la direction z de l'artère intervient, l'équation d'Euler s'écrit

$$\frac{\partial v}{\partial t} + v\frac{\partial v}{\partial z} = -\frac{1}{\rho}\frac{\partial p}{\partial z} \quad , \tag{1.63}$$

à laquelle il faut rajouter l'équation de conservation de la masse

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left[\rho A(z,t)\,\mathrm{d}z\right] = \underbrace{\rho A(z,t)v(z,t)}_{\text{masse entrante}} - \underbrace{\rho A(z+\mathrm{d}z,t)v(z+\mathrm{d}z,t)}_{\text{masse sortante}} \quad . \tag{1.64}$$

En faisant l'hypothèse usuelle que le fluide est incompressible (ρ constante), on obtient finalement

$$\rho\frac{\partial A}{\partial t} + \rho\frac{\partial (Av)}{\partial z} = 0 \quad . \tag{1.65}$$

Le système d'équations (1.57), (1.62) et (1.65) détermine la propagation de l'impulsion sanguine mais ne peut pas être résolu directement. Afin de contrôler les approximations, de manière usuelle, il est utile de passer à des variables sans dimension en posant

$$\widetilde{A} = \frac{A}{\pi r_0^2}, \quad \widetilde{p} = \frac{2r_0}{Eh}p, \quad \widetilde{v} = \frac{v}{L\Omega}, \quad \xi = \frac{z}{L}, \quad \text{et} \quad \tau = \Omega t \quad , \tag{1.66}$$

où l'on a introduit

$$\Omega = \sqrt{\frac{E}{\rho_0 r_0^2}} \quad \text{et} \quad L = \sqrt{\frac{\rho_0}{\rho}\frac{r_0 h}{2}} \quad . \tag{1.67}$$

Le système précédent se réduit à

$$\frac{\partial^2 \widetilde{A}}{\partial \tau^2} + (\widetilde{A} - 1) = \widetilde{p} \tag{1.68}$$

$$\frac{\partial \widetilde{v}}{\partial \tau} + \widetilde{v}\frac{\partial \widetilde{v}}{\partial \xi} = -\frac{\partial \widetilde{p}}{\partial \xi} \tag{1.69}$$

$$\frac{\partial \widetilde{A}}{\partial \tau} + \frac{\partial \widetilde{A}\widetilde{v}}{\partial \xi} = 0 \quad . \tag{1.70}$$

Comme ce système est clairement non-linéaire, on peut espérer avoir des solutions solitons s'il est également dispersif. Afin de le vérifier, on peut linéariser les équations autour des valeurs d'équilibre

$$\widetilde{A}_{eq} = 1, \quad \widetilde{p}_{eq} = 0 \quad \text{et} \quad \widetilde{v}_{eq} = 0 \quad . \tag{1.71}$$

Les équations pour les variations $\delta\widetilde{A}$, $\delta\widetilde{v}$ et $\delta\widetilde{p}$ autour de leurs valeurs d'équilibre sont par conséquent

$$\frac{\partial^2 \delta\widetilde{A}}{\partial\tau^2} + \delta\widetilde{A} = \delta\widetilde{p} \tag{1.72}$$

$$\frac{\partial \delta\widetilde{v}}{\partial\tau} = -\frac{\partial(\delta\widetilde{p})}{\partial\xi} \tag{1.73}$$

$$\frac{\partial \delta\widetilde{A}}{\partial\tau} + \frac{\partial(\delta\widetilde{v})}{\partial\xi} = 0 \quad . \tag{1.74}$$

On pourra trouver des solutions en ondes planes

$$(\delta\widetilde{A}, \delta\widetilde{v}, \delta\widetilde{p}) = (A_0, v_0, p_0)\; e^{i(q\xi-\omega t)} \tag{1.75}$$

à la condition que le déterminant

$$\begin{vmatrix} 1-\omega^2 & 0 & -1 \\ 0 & -i\omega & iq \\ -i\omega & iq & 0 \end{vmatrix} \tag{1.76}$$

soit nul. On obtient ainsi la relation de dispersion

$$\omega^2 = \frac{q^2}{1+q^2} \tag{1.77}$$

qui donne une vitesse de phase $v_\varphi = \omega/q = 1/\sqrt{1+q^2}$ qui dépend bien du vecteur d'onde q. On a donc bien le système dispersif attendu. On peut même noter que v_φ tend à diminuer quand q augmente, c'est-à-dire que l'on retrouve qualitativement le même type de relation de dispersion que pour les ondes hydrodynamiques en eau peu profonde ou la chaîne électrique.

La recherche de solutions solitons se fait alors selon le même principe que pour le passage de l'équation de Boussinesq à l'équation de KdV dans le cadre de l'étude des lignes électriques. On effectue une analyse des échelles de grandeur et un passage dans le repère mobile à la vitesse des ondes linéaires de grande longueur d'onde, c'est-à-dire ici $v_\varphi = 1$.

On considère toujours le cas de faible non-linéarité, c'est-à-dire que l'on cherche des solutions d'ordre ε faible par rapport aux valeurs à l'équilibre. Cependant, il s'avère que le développement doit être mené jusqu'à l'ordre 2 pour que le résultat soit intéressant.

On cherche par conséquent des solutions sous la forme

$$\widetilde{A} = 1 + \varepsilon A_1 + \varepsilon^2 A_2, \quad \widetilde{v} = \varepsilon v_1 + \varepsilon^2 v_2, \quad \text{et} \quad \widetilde{p} = \varepsilon p_1 + \varepsilon^2 p_2 \quad . \tag{1.78}$$

Le passage dans le repère mobile conduit, comme dans le cas de l'équation de Boussinesq, à rechercher des solutions dont la variation temporelle est plus lente que leur variation spatiale. On définit donc les nouvelles variables

$$\chi = \varepsilon^{1/2}(\xi - \tau) \quad \text{et} \quad \eta = \varepsilon^{3/2}\tau \quad , \tag{1.79}$$

que l'on reporte dans les équations (1.68), (1.69) et (1.70). Les termes d'ordre le plus bas donnent simplement $A_1 = v_1 = p_1$ lorsque l'on cherche des solutions localisées spatialement. Les termes d'ordre supérieur conduisent à

$$\frac{\partial p_1}{\partial \eta} + \frac{3}{2} p_1 \frac{\partial p_1}{\partial \chi} + \frac{1}{2} \frac{\partial^3 p_1}{\partial \chi^3} = 0 \tag{1.80}$$

qui est bien l'équation de KdV.

Il s'avère donc que les ondes de pression sanguine apparaissent comme des solitons de KdV dans le cadre des approximations considérées ; l'équilibre entre dispersion et non-linéarité explique pourquoi le pouls reste perceptible après une propagation longue, même jusqu'au bout des membres. Quand on introduit les ordres de grandeur corrects pour les paramètres de l'artère et pour la valeur maximale de la surpression créée par le cœur, par exemple $p_{\max} = 2\,500$ Pa (correspondant environ à 19 mm Hg, soit une tension sanguine de 19), on trouve une vitesse de propagation de l'impulsion sanguine d'environ 5 m/s, et une largeur du soliton de 1 cm.

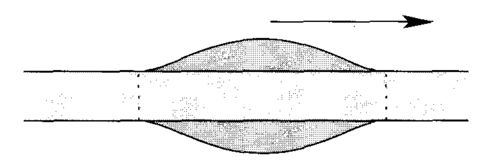


FIG. 1.17 – Représentation schématique de la déformation localisée de l'artère correspondant à la propagation de l'impulsion sanguine. Le volume de sang transporté (margé en grisé plus foncé) est proportionnel à l'aire de la solution soliton.

Outre la curiosité de considérer les ondes de pression sanguine comme des solitons, ce type de modèle peut donner des résultats plus intéressants encore puisqu'il lie les paramètres du soliton aux caractéristiques de l'artère comme son module d'Young. Dans le cas d'une irrigation normale, le volume sanguin contenu dans l'impulsion initiale est donné : il est proportionnel à l'aire de la solution soliton (cf. fig. 1.17). Cependant, comme la largeur et l'amplitude du soliton dépendent fortement du module Young, on peut vérifier que, si l'artère devient rigide (par surconsommation de tabac par exemple !), son module d'Young augmente et, par conséquent, la largeur de l'impulsion diminue, alors que son amplitude (ou « tension » mesurée par le médecin) augmente au fur et à mesure de la propagation le long des vaisseaux. Cela peut induire par exemple la rupture d'artères cérébrales.

L'approximation que nous avons faite en négligeant la viscosité du sang peut sembler grossière. Si on se contente de rajouter des effets de viscosité, on trouve effectivement que l'impulsion sanguine s'atténue rapidement. En réalité, il y a un second effet qui vient compenser l'influence de la viscosité, c'est la conicité des artères. Leur section décroît progressivement quand on s'éloigne du cœur et une modélisation plus réaliste, qui introduit la viscosité

et cette conicité, montre que les deux perturbations de l'équation de KdV qui en résultent agissent en sens opposé sur les caractéristiques du soliton, permettant le maintien de la solution localisée dont on peut vérifier l'existence chaque fois que l'on prend son pouls.

1.6 Ondes internes en océanographie

La mer d'Andaman, située dans l'océan Indien à l'Ouest de la Thaïlande, est l'un des sites où l'on peut rencontrer des solitons hydrodynamiques d'amplitude impressionnante. La stratification verticale en sel permet l'existence d'ondes au même titre que la différence de densité entre l'eau et l'air est à l'origine des ondes à la surface de la mer (fig. 1.18). Elles apparaissent à l'intérieur de l'océan et on les appelle *ondes internes de gravité*. Comme la différence de densité est très faible entre couches voisines, les ordres de grandeurs des périodes et des amplitudes sont beaucoup plus importants que pour les ondes de surface : il est ainsi possible de mesurer des amplitudes de l'ordre de 200 m.

Il était connu depuis des siècles par les navigateurs que l'on pouvait trouver dans cette mer des bandes fortement surélevées à la surface de la mer : on retrouve ainsi des traces écrites de tels phénomènes dans le livre de Maury [104] publié en 1861 : « On peut observer par temps calme ces ondulations de loin, alors que la nuit, on entend leur bruit bien avant qu'elles ne s'approchent. Elles heurtent les cotés du bateau avec une grande violence... un petit bateau peut ne pas résister à la turbulence engendrée par ces vagues extraordinaires. »

Comme ces vagues étaient situées dans des zones où la profondeur de la mer était importante, elles ne pouvaient pas être créées par les phénomènes classiques de marée qui ne concernent d'ordinaire que le voisinage de la côte. En 1965, Perry et Schimke montrèrent [123] à l'aide de mesures océanographiques précises que ces vagues étaient effectivement associées à des ondes internes océanographiques de grande amplitude. En 1980, Osborne et Burch étudièrent les mesures réunies par l'entreprise américaine Exxon [118], de manière à mieux connaître ces ondes mais surtout leurs effets sur les plateformes pétrolières. Ils conclurent que ces vagues étaient effectivement des conséquences d'ondes internes solitaires, solutions d'une équation KdV. Dans les cas où la mer peut être considérée comme formée de couches de densités différentes mais proches, les ondes internes interagissent avec la surface (cf. fig. 1.18). Ces ondes solitaires sont créés par des effets de marée, mais à très grande distance du lieu où on les observe, et elles se propagent sur des distances de plusieurs centaines de kilomètres.

Les mesures révélèrent [118] ainsi que les intervalles de temps entre les premiers solitons d'un même paquet étaient de 40 minutes, avant de décroître vers la fin. Elles montrèrent que l'amplitude de l'une des ondes internes était de soixante mètres, induisant des ondes de surface de l'ordre de deux mètres de haut. La largeur de ces ondes étant de l'ordre du kilomètre, il est possible de repérer la signature spectaculaire de ces ondes grâce aux images satellites,

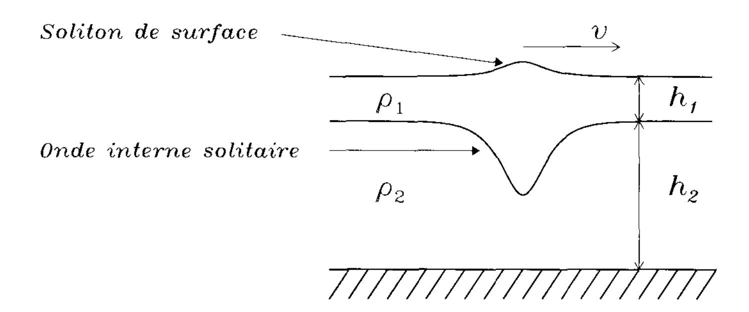


FIG. 1.18 – Une onde interne solitaire, d'amplitude η_0, dans un fluide à deux couches de densités ρ_1 et ρ_2 correspond à une dépression lorsque les hauteurs de fluides sont telles que $h_1 < h_2$. Elle provoque un petit soliton de surface dont l'amplitude est approximativement $(\rho_2 - \rho_1)\eta_0$.

comme le montre la figure 1.19. Depuis l'installation d'une station en 1995, la distribution spatiale de ces solitons est étudiée de manière systématique, ce qui permet par conséquent d'obtenir des informations sur leur création ainsi que sur les caractéristiques de leur propagation.

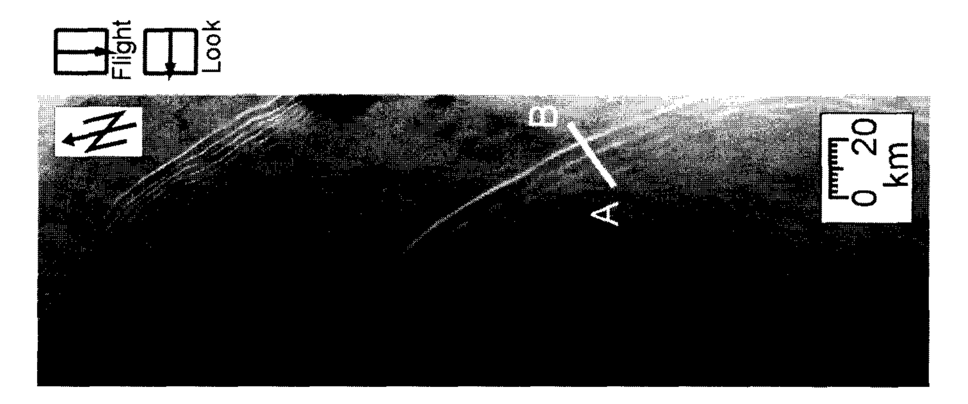


FIG. 1.19 – Vue aérienne de la surface de la mer d'Andaman. On distingue deux groupes d'ondes internes créées lors de deux marées successives (Photographie Werner Alpers et ESA, 1996).

On retrouve de telles ondes internes non-linéaires dans de nombreux océans de part le monde et notamment à l'entrée de la mer Méditerranée au niveau du détroit de Gibraltar. Par ailleurs, ce type d'onde est une des raisons évoquées pour expliquer la perte du sous-marin nucléaire américain USS Thresher, disparu en 1969, à la suite d'une descente trop rapide.

1.7 La généralité de l'équation de KdV

Il existe de nombreux autres exemples en physique où l'équation de KdV donne une modélisation approchée. Nous verrons ultérieurement (cf. chap. 8) l'exemple d'un réseau atomique qui a eu une grande importance dans la définition du concept de soliton. Un autre exemple que nous détaillerons dans un chapitre spécifique et qui a été largement étudié est l'exemple des solitons acoustiques dans un plasma qui correspondent à des ondes longitudinales non-linéaires dans le plasma. Cet exemple est bien accessible aux expériences et il a été possible de confirmer qu'une description en terme d'équation de KdV donnait une assez bonne description quantitative (cf. chap. 4).

Les exemples que nous avons vus sont cependant déjà suffisants pour illustrer la façon dont l'équation de KdV apparaît :

- Elle concerne les systèmes qui au premier ordre d'approximation sont décrits par une **équation linéaire hyperbolique** du type de l'équation d'onde $u_{tt} - c_0^2 u_{xx} = 0$.
- Il faut en outre une **faible non-linéarité** de type $\varepsilon f(u)$, avec $f(u) = Au^2 + Bu^3$ par exemple.
- Enfin, il faut une **faible dispersion** de type $\omega(q) = c_0 q(1 - \lambda_0^2 q^2)$ qui peut être introduite par des termes comme u_{xxxx} ou u_{xxtt}, pour les faibles valeurs des vecteurs d'ondes q.

Pour rester dans le cas faiblement dispersif, on considère des signaux $u(x,t)$ à variation spatiale lente, c'est-à-dire dont le spectre de Fourier $F(q)$ ne comporte que de faibles vecteurs d'onde q (tels que $\delta = q\lambda_0 \ll 1$, soit $|q|$ inférieur à une certaine valeur q_{max}). On a alors

$$u(x,t) = \int_{-\infty}^{+\infty} F(q) e^{i(qx-\omega t)} \mathrm{d}q \simeq F(0) \int_{-q_{max}}^{q_{max}} e^{i(qx - c_0 qt + c_0 \lambda_0^2 q^3 t)} \mathrm{d}q \quad . \tag{1.81}$$

En introduisant les variables sans dimension $X = x/\lambda_0$ et $T = c_0 t/\lambda_0$, on obtient

$$u(x,t) \simeq F(0) \int_{q_{max}}^{q_{max}} e^{i\delta(X-T)} \, e^{i\delta^3 T} \mathrm{d}q \quad . \tag{1.82}$$

Pour parvenir à l'équation KdV, on se place dans le repère mobile à la vitesse c_0 en définissant $\xi = X - T$ et $\tau = T$ et, comme nous l'avons déjà observé lors de l'étude de la chaîne électrique, on remarque sur l'équation (1.82) que la relation de dispersion donne un terme temporel en δ^3 si la variable spatiale est d'ordre δ. C'est ce qui conduisait à la variable temporelle en $\varepsilon^{3/2}$ dans les exemples que nous avons considérés dans lesquels la variable spatiale était en $\varepsilon^{1/2}$. La détermination de δ est faite de manière à ce que la non-linéarité et la dispersion s'équilibrent ($\delta = \varepsilon^{1/2}$ dans les cas que nous avons étudiés).

Ainsi, on réalise simplement qu'à partir d'une faible non-linéarité et d'une forme très générale de la relation de dispersion, on peut prévoir qu'un système physique aura un comportement proche de celui de l'équation de KdV.

Chapitre 2

Solitons topologiques : l'équation de sine-Gordon

L'ÉQUATION DE KDV a introduit un premier exemple de soliton mais toutes les structures non-linéaires localisées ne peuvent pas être décrites par cette équation ou des équations analogues. Ce chapitre présente une seconde famille de modèles qui sont particulièrement utiles en physique des solides et conduisent à un type de solitons dont la stabilité exceptionnelle est liée à la topologie de la surface d'énergie potentielle du système.

2.1 Un exemple mécanique simple : la chaîne de pendules couplés

Considérons la chaîne de pendules couplés de la figure 2.1. Les pendules sont mobiles autour d'un axe commun et deux pendules consécutifs sont reliés par un ressort de torsion. On note θ_n l'écart angulaire du pendule n par rapport à sa position d'équilibre. L'hamiltonien du système est la somme, sur toutes les mailles de la chaîne, de trois contributions :

$$H = \sum_n \frac{I}{2}\left(\frac{\mathrm{d}\theta_n}{\mathrm{d}t}\right)^2 + \frac{C}{2}(\theta_n - \theta_{n-1})^2 + mg\ell(1 - \cos\theta_n) \quad . \tag{2.1}$$

La première correspond à l'énergie cinétique de rotation des pendules, où I est le moment d'inertie d'un pendule par rapport à l'axe. Le deuxième terme représente l'énergie du couplage élastique entre deux pendules voisins assuré par les ressorts de torsion de constante de raideur C, tandis que le dernier terme décrit l'énergie potentielle de pesanteur d'un pendule, en notant ℓ la distance à l'axe de son centre de gravité, m sa masse et g l'accélération de la pesanteur.

Si l'on introduit le moment conjugué de θ_n, $p_n = I\dot{\theta}_n$, les équations du mouvement de la chaîne de pendules se déduisent de cet hamiltonien à l'aide

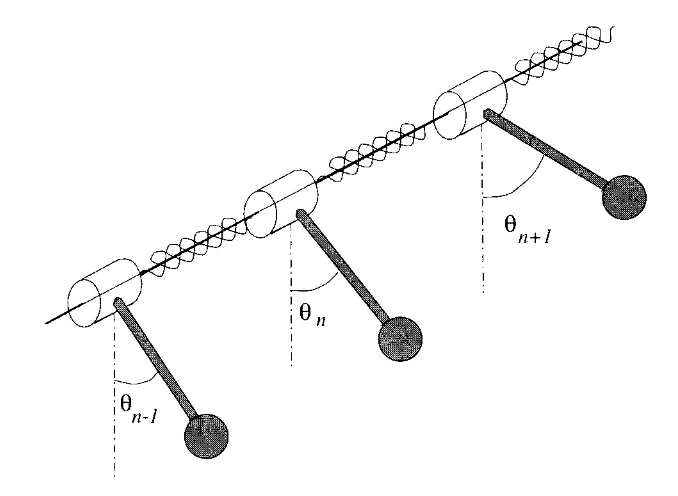


FIG. 2.1 – Chaîne de pendules d'axe commun, couplés par des ressorts de torsion, dont les équations du mouvement dans l'approximation des milieux continus conduisent au modèle de sine-Gordon.

des équations d'Hamilton

$$\frac{\mathrm{d}\theta_n}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial H}{\partial p_n} \quad \text{et} \quad \frac{\mathrm{d}p_n}{\mathrm{d}t} = -\frac{\partial H}{\partial \theta_n} \quad . \tag{2.2}$$

Elles conduisent aux équations différentielles non linéaires couplées suivantes

$$I\frac{\mathrm{d}^2\theta_n}{\mathrm{d}t^2} - C(\theta_{n+1} + \theta_{n-1} - 2\theta_n) + mg\ell \sin\theta_n = 0 \quad , \tag{2.3}$$

dont la solution exacte n'est pas connue, mais dont on peut obtenir une solution approchée grâce à l'approximation des milieux continus. Cette dernière sera valable si le couplage entre les pendules est suffisamment fort pour que la variable θ varie peu d'un pendule à l'autre.

La méthode est analogue à celle que nous avons déjà utilisée pour la ligne électrique au chapitre 1. Notons a la distance entre les pendules. On remplace les variables discrètes $\theta_n(t)$ par la fonction $\theta(x,t)$ où $\theta_n = \theta(x = na, t)$. Le développement de Taylor de $\theta_{n\pm1}$ conduit à

$$\theta_{n+1} + \theta_{n-1} - 2\theta_n \simeq a^2\frac{\partial^2\theta}{\partial x^2} + \mathcal{O}\left(a^4\frac{\partial^4\theta}{\partial x^4}\right) \tag{2.4}$$

en tenant compte de la décroissance rapide de ses termes successifs qui contiennent les dérivées d'ordre croissant d'une fonction qui varie lentement avec l'espace. Contrairement à ce que nous avions fait pour établir l'équation de KdV, nous limitons ici le développement à l'ordre le plus bas, c'est-à-dire à son premier terme non nul. Nous verrons dans la section 2.2.2 pourquoi cette

approximation est suffisante pour décrire convenablement la physique de la chaîne de pendules.

En introduisant les deux quantités suivantes,

$$\omega_0^2 = \frac{mg\ell}{I} \quad \text{et} \quad c_0^2 = \frac{Ca^2}{I} \quad , \tag{2.5}$$

homogènes respectivement au carré d'une pulsation et d'une vitesse, on aboutit finalement à l'équation aux dérivées partielles

$$\frac{\partial^2 \theta}{\partial t^2} - c_0^2 \frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} + \omega_0^2 \sin\theta = 0 \quad , \tag{2.6}$$

qui est connue sous le nom d'équation de sine-Gordon (ou plus brièvement SG). Comme l'équation de KdV, c'est une équation *totalement intégrable* qui admet des solutions solitons exacts.

La chaîne de pendules n'est bien sûr qu'une réalisation approximative de l'équation SG puisqu'elle n'est pas décrite exactement par l'équation continue (les effets de la discrétisation n'étant pas totalement négligeables) mais surtout parce qu'elle est faiblement dissipative en raison des frottements au niveau de l'axe de rotation des pendules. Elle constitue néanmoins un modèle intéressant qui permet d'observer les propriétés remarquables des solitons. En étudiant l'équation SG, nous verrons comment ce système mécanique permet de montrer avec une expérience simple des phénomènes typiques de la théorie de la relativité et de la mécanique quantique !

2.2 Les solutions de l'équation de sine-Gordon

2.2.1 Topologie du paysage énergétique

Pour analyser l'ensemble des solutions de l'équation SG, il est utile de considérer la représentation de la figure 2.2 de l'énergie potentielle de pesanteur des pendules en fonction de θ et de la coordonnée d'espace x le long de la chaîne. Quelle que soit sa position x, un pendule est soumis au même potentiel $V(\theta) = mg\ell(1 - \cos\theta)$ de sorte que la surface d'énergie potentielle de pesanteur apparaît comme une tôle ondulée.

Pour se représenter complètement l'énergie potentielle du système, il faut tenir compte de l'énergie de couplage harmonique provenant des ressorts de torsion. Dans la limite des milieux continus, on voit la chaîne de pendules couplés comme une ligne élastique (si θ varie en un point x_0, cela tend à entraîner une variation similaire aux points voisins), massive, placée sur les ondulations du potentiel $V(\theta)$. Cette représentation fait immédiatement apparaître quelques caractéristiques fondamentales qui distinguent le modèle SG du modèle KdV étudié précédemment.

On constate que le système possède *plusieurs états fondamentaux dégénérés énergétiquement*. On peut en effet mettre le système dans son état fondamental en plaçant toute la chaîne en $\theta = 0$ ou en $\theta = 2p\pi$ (p étant un entier).

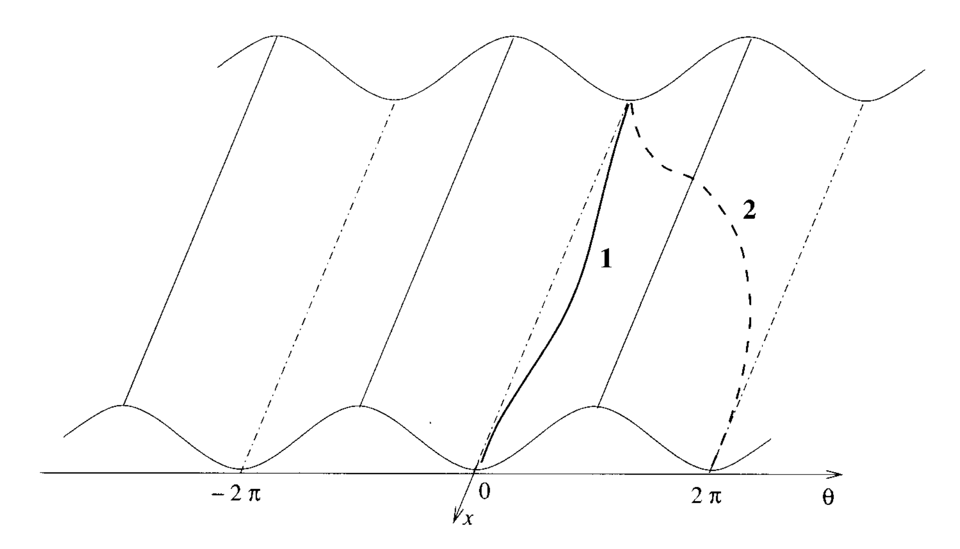


FIG. 2.2 – Topologie du paysage d'énergie potentielle du modèle SG. Les lignes en trait fort ou interrompu représentent la position d'une ligne élastique massive imaginaire qui aurait la même équation de mouvement que la chaîne de pendules dans l'approximation des milieux continus.

Ce n'est évidemment pas le cas du modèle KdV puisque l'eau dans un canal n'a qu'un seul niveau d'équilibre possible. Cette caractéristique du modèle SG permet d'envisager *plusieurs familles de solutions :*

- des solutions dans lesquelles toute la chaîne reste à l'intérieur d'une même vallée de potentiel (cas **1** de la figure 2.2),
- des solutions dans lesquelles la chaîne passe d'une vallée à l'autre (cas **2** de la figure 2.2, qui correspond à une solution soliton).

Plus quantitativement, on peut distinguer les solutions par leur comportement aux limites $\pm\infty$:

$$\lim_{x\to+\infty} \theta - \lim_{x\to-\infty} \theta = 0 \qquad \text{dans le cas } \mathbf{1} \tag{2.7}$$

$$\lim_{x\to+\infty} \theta - \lim_{x\to-\infty} \theta = 2p\pi \quad (p \neq 0) \quad \text{dans le cas } \mathbf{2}. \tag{2.8}$$

Ces deux solutions sont dites *topologiquement différentes* car leur différence est une propriété globale de la solution. En effet, si l'on se place pour $|x| \to \infty$, un examen local des deux solutions ne permet pas de faire de distinction puisque l'on voit des pendules dans leur état d'énergie minimale. C'est seulement en regardant globalement la chaîne de pendules que l'on peut réaliser que l'on a fait un tour complet en passant d'une extrémité à l'autre.

2.2.2 Les solutions de faible amplitude : la limite linéaire

Considérons d'abord la situation $\theta \ll 2\pi$, correspondant à un cas particulier des solutions de type **1**. En prenant la limite linéaire du terme sinusoïdal, l'équation SG (2.6) se réduit à

$$\frac{\partial^2\theta}{\partial t^2} - c_0^2\frac{\partial^2\theta}{\partial x^2} + \omega_0^2\theta = 0 \quad , \tag{2.9}$$

qui admet les solutions en ondes planes[1]

$$\theta = \theta_0\ e^{i(qx-\omega t)} + \text{c.c.} \tag{2.10}$$

dans lesquelles la pulsation ω et q, vecteur d'onde à une dimension, sont reliés par la relation de dispersion $\omega^2 = \omega_0^2 + c_0^2 q^2$, représentée sur la figure 2.3.

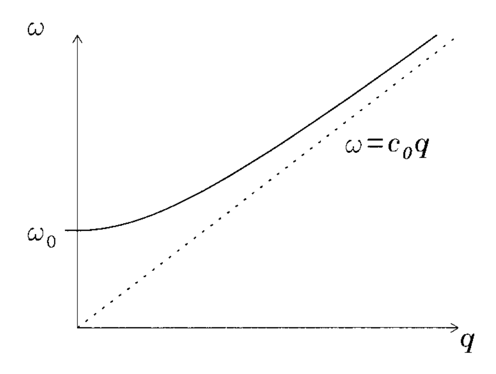


FIG. 2.3 – Relation de dispersion des ondes de faible amplitude dans le modèle SG.

Dans la limite des grands vecteurs d'ondes q, la vitesse de phase des ondes linéaires tend vers la constante c_0. On constate cependant que ω n'est pas proportionnel à q, c'est-à-dire que l'équation SG décrit des ondes *dispersives* en raison de la présence du terme $\omega_0 \sin\theta$. Comme l'équation KdV, l'équation SG contient par conséquent, simultanément, *dispersion et non-linéarité*, mais pour SG ces deux aspects sont introduits par le même terme de l'équation.

C'est cette particularité qui nous a permis, en faisant l'approximation des milieux continus, de nous limiter à la dérivée seconde $\partial^2\theta/\partial x^2$ dans le développement du terme en différence finie $(\theta_{n+1} + \theta_{n-1} - 2\theta_n)$ au lieu de pousser le développement jusqu'à la dérivée quatrième comme dans l'étude de la chaîne électrique au chapitre 1. En nous limitant au deuxième ordre pour SG nous conservons néanmoins la dispersion, c'est-à-dire que nous ne perdons pas un aspect physique essentiel du système.

La relation de dispersion des ondes telles que $\theta \ll 2\pi$ montre également que les pulsations $\omega < \omega_0$ correspondent à des vecteurs d'ondes q imaginaires,

1. Tout au long de l'ouvrage, la notation c.c. correspond à l'abréviation de complexe conjugué.

c'est-à-dire à des ondes atténuées exponentiellement. C'est une propriété physique importante du modèle SG : il possède une bande interdite (un « gap ») dans le spectre de ses excitations de faible amplitude. Cette propriété, facile à vérifier pour un système physique donné, permet de dire immédiatement s'il a une chance d'être décrit par une équation de la « famille » SG.

2.2.3 Solutions solitons

Pour déterminer les solutions de l'équation SG, on peut remarquer qu'elle est invariante par une transformation de Lorentz relative à la vitesse c_0 ce qui permet de chercher des solutions statiques et de déduire ensuite les solutions mobiles à la vitesse v par une transformation de Lorentz. Cependant, pour obtenir les solutions solitons, on peut aussi, comme pour KdV, chercher des solutions à profil constant mobiles à la vitesse v, c'est-à-dire ne dépendant que de la variable $z = x - vt$. On retrouvera alors l'invariance des solutions par la transformation de Lorentz.

Pour les solutions à profil constant, l'équation SG devient

$$v^2 \frac{\mathrm{d}^2\theta}{\mathrm{d}z^2} - c_0^2 \frac{\mathrm{d}^2\theta}{\mathrm{d}z^2} + \omega_0^2 \sin\theta = 0 \quad , \tag{2.11}$$

ou bien

$$\frac{\mathrm{d}^2\theta}{\mathrm{d}z^2} = \frac{\omega_0^2}{c_0^2 - v^2} \sin\theta \quad . \tag{2.12}$$

En multipliant par $\mathrm{d}\theta/\mathrm{d}z$ et en intégrant par rapport à z on obtient

$$\frac{1}{2}\left(\frac{\mathrm{d}\theta}{\mathrm{d}z}\right)^2 = -\frac{\omega_0^2}{c_0^2 - v^2} \cos\theta + C_1. \tag{2.13}$$

La constante d'intégration C_1 est déterminée par les conditions aux limites imposées à la solution. Comme on cherche une solution soliton, c'est-à-dire localisée spatialement, on doit avoir $\theta(z) \to 0 \pmod{2\pi}$ pour $|z| \to \infty$ puisqu'on veut qu'à l'infini les pendules soient dans leur état fondamental. Pour la même raison on impose $\mathrm{d}\theta/\mathrm{d}z \to 0$ si $|z| \to \infty$, ce qui donne $C_1 = \omega_0^2/(c_0^2 - v^2)$ et, par conséquent

$$\frac{1}{2}\left(\frac{\mathrm{d}\theta}{\mathrm{d}z}\right)^2 - \frac{\omega_0^2}{c_0^2 - v^2}(1 - \cos\theta) = 0 \quad . \tag{2.14}$$

Comme pour la recherche des solutions solitons de l'équation de KdV, on peut raisonner en considérant que cette expression représente la somme de l'énergie cinétique (vis-à-vis du « pseudo-temps » z) et de l'énergie potentielle d'une particule fictive. La solution cherchée $\theta(z)$ décrit donc le mouvement à énergie totale nulle de cette particule dans le potentiel

$$V_{\mathrm{eff}}(\theta) = -\frac{\omega_0^2}{c_0^2 - v^2}(1 - \cos\theta) \quad . \tag{2.15}$$

***13.12. Exercice* (la variété L_Φ est lagrangienne).** — Montrer que, dans des coordonnées canoniques, l'idéal des polynômes considéré ci-dessus est engendré par les polynômes

$$\eta_i\eta_j \quad (i \neq j), \qquad \eta_i(\eta_i - 1), \qquad 1 - \sum_i \eta_i.$$

En déduire que l'ensemble L_Φ est le sous-ensemble formé des points $(x_1, \ldots, x_n, \eta_1, \ldots, \eta_n)$ de $U \times \mathbb{C}^n$ où tous les η_i sauf un sont nuls, ce dernier valant 1.

Compatibilité avec une « métrique ». — Donnons-nous comme au § 13.c une forme bilinéaire symétrique non dégénérée g sur TM, que nous appelons encore « métrique ». Nous dirons que le champ de Higgs Φ, ou le produit $\star$, est *compatible* à la métrique g si l'on a, pour tout triplet (ξ_1, ξ_2, ξ_3) de champs de vecteurs sur M, l'égalité

$$g(\xi_1 \star \xi_2, \xi_3) = g(\xi_1, \xi_2 \star \xi_3).$$

Contrairement au cas des connexions, une « métrique » ne permet pas à elle seule de définir naturellement un champ de Higgs symétrique compatible avec elle.

Si un champ unité existe, on peut considérer la 1-forme différentielle e^* définie par adjonction. En tant que forme linéaire sur le fibré tangent, elle s'exprime par

$$e^*(\xi) = g(e, \xi).$$

On a alors $g(\xi_1, \xi_2) = e^*(\xi_1 \star \xi_2)$.

Il peut être utile de mettre en évidence la forme trilinéaire

$$c(\xi_1, \xi_2, \xi_3) = g(\xi_1 \star \xi_2, \xi_3) = e^*((\xi_1 \star \xi_2) \star \xi_3).$$

***13.13. Exercice* (algèbres de Frobenius commutatives).** — Soit V un $\mathbb{C}$-espace vectoriel de dimension finie muni d'une forme linéaire ℓ, d'une forme bilinéaire non dégénérée b et d'une forme trilinéaire t. En considérant l'isomorphisme $B : V \xrightarrow{\sim} V^*$ défini par b, la forme trilinéaire t permet de définir un produit sur V : on impose que, pour tous $v_1, v_2 \in V$, les deux formes linéaires $B(v_1 \star v_2)$ et $c(v_1, v_2, \bullet)$ coïncident. Donner les conditions sur ℓ, b, t exprimant que $B^{-1}(\ell)$ est l'unité et que le produit est commutatif et associatif.

On dit alors que $(V, \star, e, b)$ ou, de manière équivalente (V, ℓ, b, t), est une *algèbre de Frobenius*[14].

[14] L'exemple originellement considéré par Frobenius lors de ses travaux sur les caractères des groupes finis est l'algèbre (non commutative en général) d'un tel groupe sur un corps (voir par exemple [**Lit40**, chap. IV]). Le fait qu'une telle algèbre soit « de Frobenius » au

14. Connexions méromorphes

Soit $\mathscr{M}$ un fibré méromorphe à pôles le long d'une sous-variété analytique Z, *i.e.* un $\mathscr{O}_M(*Z)$-module localement libre de rang d. Une connexion sur $\mathscr{M}$ est définie comme dans le cas holomorphe, à savoir comme un homomorphisme $\mathbb{C}$-linéaire $\nabla : \mathscr{M} \to \Omega^1_M \otimes_{\mathscr{O}_M} \mathscr{M}$ satisfaisant la règle de Leibniz.

On notera que, dans une base locale de $\mathscr{M}$ sur $\mathscr{O}_M(*Z)$, la matrice Ω de la connexion est à éléments dans $\mathscr{O}_M(*Z) \otimes_{\mathscr{O}_M} \Omega^1_M = \Omega^1_M(*Z)$.

Les considérations du § 11 s'étendent au cas méromorphe de manière immédiate. On notera que la matrice P du § 11.a est maintenant dans $\Gamma(U, \mathrm{GL}_d(\mathscr{O}_M(*Z)))$. Le faisceau des sections horizontales $\mathscr{M}^\nabla_{|M\smallsetminus Z}$ est alors un faisceau localement constant d'espaces vectoriels de rang fini qui correspond, d'après le théorème 15.8, à une représentation linéaire du groupe fondamental $\pi_1(M \smallsetminus Z, o)$: c'est la *représentation de monodromie* attachée au fibré méromorphe à connexion $(\mathscr{M}, \nabla)$.

***14.1. Exercice* (torsion d'une connexion par une forme différentielle logarithmique).** — Soit $f \in \Gamma(M, \mathscr{O}_M(*Z))$ une fonction méromorphe sur M, à pôles le long de Z, et soit $\omega = df/f$ sa différentielle logarithmique.

(1) Montrer que le fibré méromorphe à connexion $(\mathscr{O}_M(*Z), d + \omega)$ est à monodromie triviale, *i.e.* que le faisceau de ses sections horizontales sur $M \smallsetminus Z$ est isomorphe au faisceau constant $\mathbb{C}_{M\smallsetminus Z}$ (on pourra écrire $d + \omega = f^{-1} \circ d \circ f$).

(2) En déduire que, si $(\mathscr{M}, \nabla)$ est un fibré méromorphe à connexion sur M à pôles le long de Z, les faisceaux de sections horizontales de $(\mathscr{M}, \nabla)_{|M\smallsetminus Z}$ et $(\mathscr{M}, \nabla + \omega\,\mathrm{Id})_{|M\smallsetminus Z}$ sont isomorphes (on pourra utiliser l'exercice 12.11).

On dira qu'une connexion sur un fibré méromorphe est *intégrable* (ou *plate*) si sa restriction à $M \smallsetminus Z$ est une connexion intégrable sur le fibré holomorphe $\mathscr{M}_{|M\smallsetminus Z}$.

Si $\mathscr{E}$ est un réseau d'un fibré méromorphe à connexion $(\mathscr{M}, \nabla)$, il se peut que $\nabla(\mathscr{E})$ ne soit pas contenu dans $\Omega^1_M \otimes_{\mathscr{O}_M} \mathscr{E}$. On a cependant

$$\nabla(\mathscr{E}) \subset \nabla(\mathscr{M}) \subset \Omega^1_M \underset{\mathscr{O}_M}{\otimes} \mathscr{M} = \Omega^1_M(*Z) \underset{\mathscr{O}_M}{\otimes} \mathscr{E}.$$

Ainsi, ∇ définit une *connexion méromorphe* qui n'est pas nécessairement holomorphe sur le fibré $\mathscr{E}$.

---

sens donné plus haut est montré par exemple dans [**CR62**, th. 62.1], où l'on trouvera aussi (th. 61.3) d'autres caractérisations des algèbres de Frobenius.

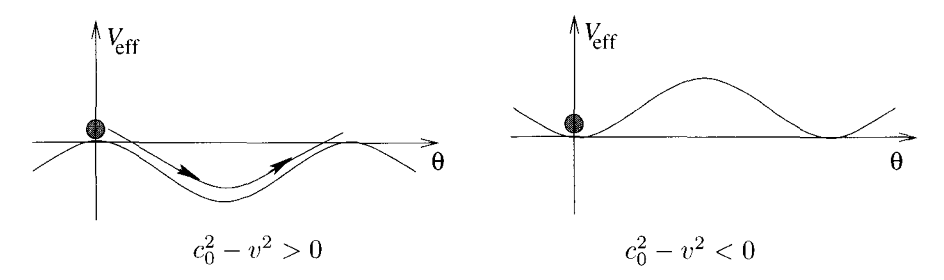


FIG. 2.4 – Recherche des solutions possibles dans le modèle SG en considérant une particule fictive mobile dans le pseudo-potentiel $V_{\rm eff}(\theta)$.

La figure 2.4 montre que, pour $c_0^2 - v^2 > 0$, il existe un mouvement possible pour une particule fictive partant du repos en $\theta = 0$. Elle peut rejoindre $\theta = 2\pi$ (ou $\theta = -2\pi$) qu'elle atteindra avec une « vitesse » $\mathrm{d}\theta/\mathrm{d}z$ nulle au bout d'un « temps fictif » z infini. On contraire, pour $c_0^2 - v^2 < 0$, si la particule est initialement au repos, il n'y a pas de mouvement possible. Ce raisonnement montre déjà que les solitons ne peuvent se propager qu'à des vitesses *inférieures* à c_0. Il montre également qu'il n'existe pas de solution à profil constant, connectant la même vallée[2].

Dans le cas $v^2 < c_0^2$, on peut obtenir la solution soliton à partir de l'équation (2.14) qui donne

$$\frac{\sqrt{2}\omega_0}{\sqrt{c_0^2 - v^2}}\,\mathrm{d}z = \pm\,\frac{\mathrm{d}\theta}{\sqrt{1-\cos\theta}} \tag{2.16}$$

soit

$$\frac{\sqrt{2}\omega_0}{\sqrt{c_0^2 - v^2}}\,(z - z_0) = \pm\int\frac{\mathrm{d}\theta}{\sqrt{1-\cos\theta}} = \pm\int\frac{\mathrm{d}\theta}{\sqrt{2}\sin\frac{\theta}{2}} \qquad (0 < \theta < 2\pi) \tag{2.17}$$

ou z_0 est une constante d'intégration. Or,

$$\int\frac{\mathrm{d}\theta}{\sqrt{2}\sin\frac{\theta}{2}} = \frac{1}{\sqrt{2}}\int\frac{4\mathrm{d}t}{1+t^2}\,\frac{1+t^2}{2t} = \sqrt{2}\int\frac{\mathrm{d}t}{t} = \sqrt{2}\ln t \tag{2.18}$$

avec $t = \tan(\theta/4)$. La solution est donc

$$\frac{\omega_0}{\sqrt{c_0^2 - v^2}}(z - z_0) = \pm\ln\tan\frac{\theta}{4} \quad , \tag{2.19}$$

2. Le raisonnement est effectué en admettant que la position d'équilibre des pendules correspond à la position $\theta = 0$, mod(2π). Quand on excite paramétriquement le pendule par une oscillation de son point de suspension, on peut trouver [26, 27] des conditions d'excitation où la position stable est $\theta = \pi$. On peut alors vérifier qu'il est possible de générer des solutions analogues aux solitons sur une chaîne de pendules inversés.

vitesse, ou même le stopper complètement, par des perturbations mais pas le faire disparaître puisque cela entraînerait un changement de charge topologique.

L'existence des deux types de solutions (soliton et antisoliton) distingue également le modèle SG du modèle KdV que nous avions traité précédemment où l'on avait trouvé des impulsions positives mais montré que les impulsions négatives ne se propageaient pas comme des solutions localisées spatialement.

Comme la description de la chaîne de pendules par l'équation SG a été obtenue en faisant l'approximation des milieux continus, les solutions de l'équation SG ne sont pas des solutions exactes pour la chaîne. Il faut tester la validité de la solution soliton dans ce cadre. On peut réécrire la solution (2.20) sous la forme

$$\theta(x,t) = 4 \arctan \exp\left(\pm \frac{x - vt}{L}\right) \quad \text{avec} \quad L = \frac{c_0}{\omega_0}\sqrt{1 - \frac{v^2}{c_0^2}} \quad , \qquad (2.22)$$

dans laquelle L mesure l'extension spatiale de la solution. Cette expression met en évidence plusieurs propriétés de la solution :

(i) La contraction de Lorentz du soliton qui correspond à la racine dans l'expression de L : la largeur du soliton tend vers 0 lorsque sa vitesse v tend vers la vitesse du son c_0. Cette contraction de Lorentz est nettement visible sur l'expérience de la chaîne de pendules quand on compare la largeur d'un soliton statique à celle d'un soliton que l'on a lancé à vitesse élevée. C'est ainsi que le chaîne de pendules permet de faire une « expérience de relativité » comme nous l'avions indiqué précédemment.

(ii) L'importance du poids relatif du terme de couplage c_0 par rapport au terme de potentiel de site ω_0. La largeur au repos du soliton est $L_0 = c_0/\omega_0 = a\sqrt{C/(mg\ell)}$.

L'approximation des milieux continus n'étant valable que si $L_0/a \gg 1$, elle sera vérifiée lorsque $C \gg mg\ell$. Cela signifie que l'énergie de torsion des ressorts liant les pendules doit être grande par rapport à l'énergie de rappel de pesanteur sur chaque pendule. Une grande valeur de C assure naturellement que les angles $\theta_n(t)$ et $\theta_{n+1}(t)$ de deux pendules voisins restent proches l'un de l'autre. L'approximation correspond donc à une approximation de *couplage fort*.

2.2.4 Énergie du soliton

On peut la calculer à partir de l'hamiltonien (2.1). Dans l'approximation des milieux continus, le terme correspondant à une maille divisé par la valeur du paramètre de maille donne l'hamiltonien par unité de longueur, c'est-à-dire la densité hamiltonienne, $\mathcal{H}$,

$$\mathcal{H}(x,t) = \frac{1}{a}\left[\frac{I}{2}\left(\frac{\partial\theta}{\partial t}\right)^2 + \frac{Ca^2}{2}\left(\frac{\partial\theta}{\partial x}\right)^2 + mg\ell(1 - \cos\theta)\right] \quad , \qquad (2.23)$$



FIG. 2.7 – Kink *glacé*, obtenu naturellement, par un dépôt de neige sur une barre horizontale (Photographie Thierry Cretegny, 2001).

si l'on se limite à l'ordre le plus bas pour remplacer le terme $(\theta_{n+1} - \theta_n)^2$ comme lors de l'obtention de l'équation SG.

Si l'on s'intéresse uniquement à l'expression de $\mathcal{H}$ pour un soliton, il est judicieux d'utiliser à nouveau la variable $z = x - vt$, telle que $\theta(x,t) = \theta(z)$, de manière à obtenir l'expression

$$\mathcal{H}(z,t) = \frac{1}{a}\left[\frac{Iv^2}{2}\left(\frac{\mathrm{d}\theta}{\mathrm{d}z}\right)^2 + \frac{Ca^2}{2}\left(\frac{\mathrm{d}\theta}{\mathrm{d}z}\right)^2 + mg\ell(1-\cos\theta)\right] \quad . \qquad (2.24)$$

En utilisant l'expression de c_0^2 ainsi que l'équation (2.14), on peut exprimer tous les termes de $\mathcal{H}$ en fonction de $\mathrm{d}\theta/\mathrm{d}z$ que l'on remplace ensuite par sa valeur tirée de la dérivation de la solution (2.20). On obtient finalement

$$\mathcal{H} = \frac{Ic_0^2}{a}\left(\frac{\mathrm{d}\theta}{\mathrm{d}z}\right)^2 = \frac{4I\omega_0^2}{a(1-v^2/c_0^2)}\,\mathrm{sech}^2\,\frac{\omega_0(z-z_0)}{\sqrt{c_0^2-v^2}} \quad . \qquad (2.25)$$

La forme en sech^2 correspond bien à une densité d'énergie *localisée* autour du centre du soliton, d'où sa dénomination de « quasi-particule ».

Comme $\int \mathrm{d}x \,\mathrm{sech}^2 x = 2$, une intégration spatiale donne l'énergie du soliton

$$E = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathcal{H}(x,t)\,\mathrm{d}x = \frac{8I\,\omega_0\,c_0}{\sqrt{1-v^2/c_0^2}} \tag{2.26}$$

qui a la forme d'une expression « relativiste », vis-à-vis de la vitesse c_0, pour l'énergie d'une particule de masse $m_0 = 8I\omega_0/c_0$. Le soliton de SG semble par conséquent correspondre encore plus à une quasi-particule que celui de KdV.

Il est intéressant de noter que l'on peut obtenir l'énergie du soliton sans même connaître la forme analytique de sa solution. En repartant de l'expression (2.25) de la densité hamiltonienne, on obtient l'énergie

$$E = \frac{Ic_0^2}{a}\int_{-\infty}^{+\infty}\left(\frac{\mathrm{d}\theta}{\mathrm{d}z}\right)\left(\frac{\mathrm{d}\theta}{\mathrm{d}z}\right)\mathrm{d}z \quad , \tag{2.27}$$

dans laquelle on peut remplacer l'un des deux facteurs $\mathrm{d}\theta/\mathrm{d}z$ par son expression tirée de (2.14), pour obtenir

$$E = \frac{Ic_0^2}{a}\,\frac{\sqrt{2}\omega_0}{\sqrt{c_0^2-v^2}}\int_{-\infty}^{+\infty}\sqrt{1-\cos\theta}\left(\frac{\mathrm{d}\theta}{\mathrm{d}z}\right)\mathrm{d}z \tag{2.28}$$

$$= \frac{Ic_0^2}{a}\,\frac{\sqrt{2}\omega_0}{\sqrt{c_0^2-v^2}}\int_{\theta=0}^{\theta=2\pi}\sqrt{1-\cos\theta}\,\mathrm{d}\theta \quad , \tag{2.29}$$

où l'intégration en θ est facile à effectuer. Cette méthode est également applicable à d'autres équations de la famille de l'équation SG que l'on ne sait pas résoudre exactement mais dont on peut prévoir, par la topologie du potentiel, qu'elles ont des solutions quasi-solitons. En intégrant par rapport à θ la racine de l'expression du potentiel $V(\theta)$, on peut obtenir l'énergie de solutions dont on ne peut pas donner l'expression analytique.

2.2.5 Solutions multisolitons

Il existe une méthode systématique pour construire les solutions multisolitons des équations totalement intégrables dont fait partie l'équation SG. Cette méthode dite « de diffusion inverse », que nous présenterons ultérieurement (cf. chap. 7), permet d'obtenir des solutions comportant un nombre quelconque de solitons ou d'antisolitons.

Il est cependant intéressant d'étudier dès maintenant une solution multisolitons particulière car elle nous renseigne sur le comportement des solitons quand ils interagissent. Considérons la solution suivante de l'équation SG :

$$\theta_{SA} = 4\arctan\left[\frac{\sinh\dfrac{v\omega_0 t}{c_0}\dfrac{1}{\sqrt{1-v^2/c_0^2}}}{\dfrac{v}{c_0}\cosh\dfrac{\omega_0 x}{c_0}\dfrac{1}{\sqrt{1-v^2/c_0^2}}}\right] \quad . \tag{2.30}$$

En notant θ_S et θ_A les solutions soliton et antisoliton déterminées précédemment, et en utilisant l'égalité $\arctan(1/z) = \pi/2 - \arctan(z)$, on peut parvenir à

$$\lim_{t\to+\infty} \theta_{SA} \simeq \theta_S(x + vt + \Delta) + \theta_A(x - vt - \Delta) \tag{2.31}$$

$$\lim_{t\to-\infty} \theta_{SA} \simeq \theta_S(x + vt - \Delta) + \theta_A(x - vt + \Delta) \quad , \tag{2.32}$$

où l'on a introduit le déphasage $\Delta = \dfrac{c_0}{\omega_0}\sqrt{1 - \dfrac{v^2}{c_0^2}} \ln\left(\dfrac{v}{c_0}\right)$.

Cette forme asymptotique montre que la solution correspond à la collision d'un antisoliton et d'un soliton qui se croisent sans se détruire, comme l'indique la représentation de la solution θ_{SA} à différents instants sur la figure 2.8. Il existe, pendant la collision, une situation où le champ θ passe par zéro en tout point, mais la dérivée θ_t n'est jamais identiquement nulle. Les deux excitations ressortent de la collision intactes mais déplacées spatialement par rapport aux positions qu'elles auraient occupées sans la collision, comme le montre la figure 2.9. La collision a produit un déphasage, comme la collision de solitons de KdV représentée sur la figure 1.10.

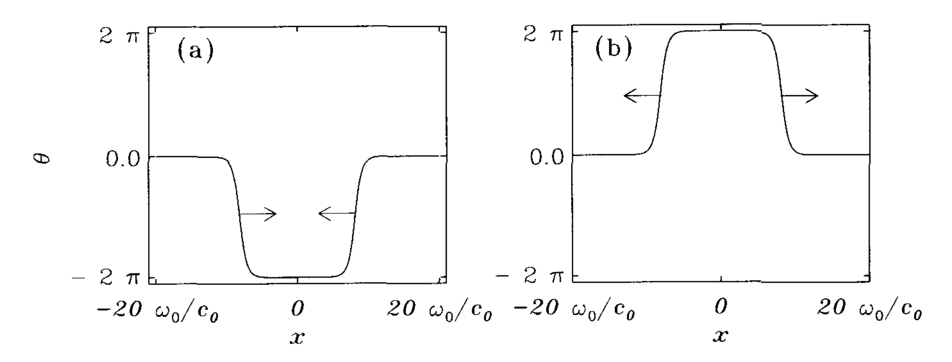


FIG. 2.8 – Représentation de la solution multisolitons (2.30) bien avant la collision (fig. a) et bien après (fig. b). On notera que, dans un milieu infini, la valeur de la solution pour $x \to \pm\infty$ ne varie pas (cela correspond à la conservation de la charge topologique). Compte tenu de cette condition aux limites, lorsque les deux solitons se croisent, la valeur de θ entre eux change de 4π. En effet, le soliton et l'antisoliton, qui interpolent entre deux états différents du système, représentent des transitions de 2π dans la valeur de θ. Selon que l'on rencontre d'abord la transition décroissante ou croissante, l'aspect de la solution multisolitons change complètement.

En observant les trajectoires des deux excitations (tout au moins tant qu'on peut les distinguer l'une de l'autre, donc hors du domaine très proche de la zone de collision), on constate que celles-ci accélèrent lorsqu'elles s'approchent l'une de l'autre puis ralentissent quand elles se séparent. Cela montre

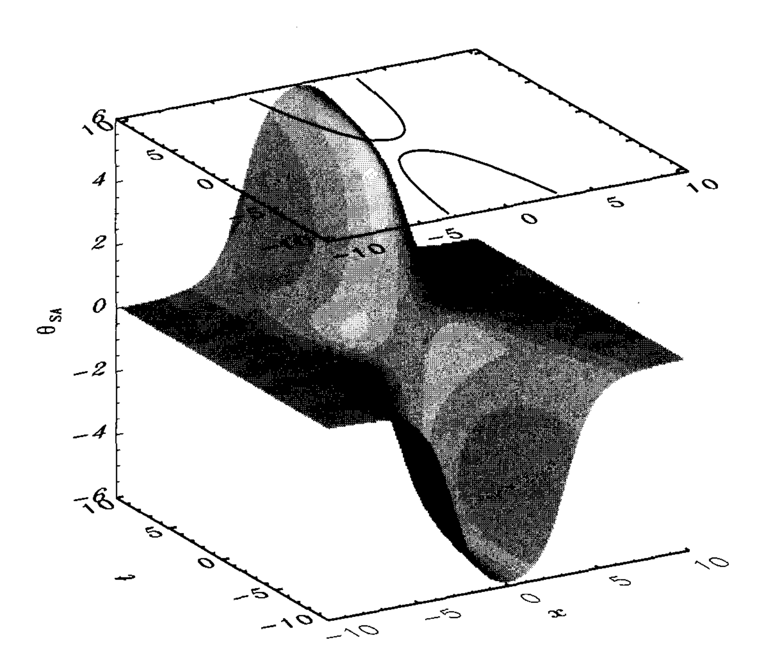


FIG. 2.9 – Représentation de la dynamique d'une solution multisolitons (2.30) (avec $\omega_0 = 1$, $c_0 = 1$, $v = 0{,}1$). La projection verticale présente l'évolution du contour $\theta = \pi$ qui met en valeur la dynamique du centre des deux excitations en fonction du temps. Au moment de la collision, la notion de soliton en tant qu'excitation individuelle perd temporairement son sens : on ne peut plus suivre la position des solitons. Leur trajectoire semble interrompue alors que le soliton et l'antisoliton se croisent avant de poursuivre leur mouvement dans leur direction initiale mais avec un décalage par rapport à la trajectoire qu'ils auraient suivie s'il n'y avait pas eu collision.

que l'interaction *soliton-antisoliton* est attractive, alors qu'une étude similaire montrerait que les interactions entre deux solitons ou deux antisolitons sont répulsives. C'est la raison pour laquelle une solution *à profil constant* avec N solitons (ou antisolitons) ne peut exister : les interactions entre les composantes de la solution tendent à faire varier les distances relatives de ces composantes. Ainsi, par exemple, deux solitons statiques placés sur la chaîne de pendules vont se mettre en mouvement afin de s'éloigner l'un de l'autre sous l'effet de leur répulsion mutuelle. C'est pourquoi la recherche de solutions à profil constant n'a pas donné de solutions multisolitons.

2.2.6 La solution breather

La solution soliton-antisoliton a mis en évidence une attraction, ce qui suggère de représenter le mouvement du soliton dans le « champ » de

l'antisoliton comme le mouvement d'une particule soumise à un potentiel effectif (cf. fig. 2.10). L'énergie totale du système étant conservée, lorsque le soliton approche du creux de son potentiel d'interaction avec l'antisoliton, son énergie cinétique augmente pour compenser la diminution d'énergie potentielle. La particule venant de $-\infty$ accélère lorsqu'elle arrive au voisinage de l'antisoliton puis ralentit en ressortant du puits pour atteindre $+\infty$ avec une vitesse identique à sa vitesse avant la collision. Cette situation, qui est bien celle que l'on observe pendant la collision (fig. 2.9) correspond à la trajectoire schématique notée (1) sur la figure 2.10.

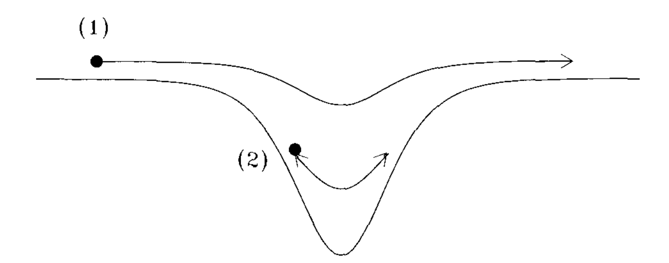


FIG. 2.10 – Représentation du croisement (trajectoire notée 1) soliton-antisoliton et du breather (trajectoire notée 2). La courbe représente le potentiel effectif dans lequel est placé un soliton en raison de son interaction avec un antisoliton. Les flèches correspondent à une représentation totalement schématique du déplacement du soliton.

On comprend que cette situation est très « fragile », puisqu'une faible dissipation peut empêcher la particule de ressortir du puits et donc de s'échapper vers $+\infty$. On a alors annihilation de la paire soliton-antisoliton comme on le voit sur la véritable chaîne de pendules où les frottements ne sont évidemment pas totalement absents.

La figure permet d'imaginer une autre solution dans laquelle le soliton aurait une énergie initiale qui le place *dans* le puits de potentiel attractif de l'antisoliton : cela correspond à la trajectoire notée (2) sur la figure 2.10. On s'attend alors à une solution oscillante, mais localisée puisqu'on peut approximativement la considérer comme une paire soliton-antisoliton liée.

Cette solution existe dans le modèle SG et se nomme *solution breather* :

$$\theta_B = 4 \arctan \left[\frac{\sin \dfrac{u\omega_0 t}{c_0} \dfrac{1}{\sqrt{1+u^2/c_0^2}}}{\dfrac{u}{c_0} \cosh \dfrac{\omega_0 x}{c_0} \dfrac{1}{\sqrt{1+u^2/c_0^2}}} \right] , \tag{2.33}$$

où u est un paramètre qui n'a pas la signification d'une vitesse. La solution que nous donnons par l'expression (2.33) est au repos, en ce sens qu'elle correspond à une oscillation, localisée autour de sa position $x = 0$, qui ne se propage pas. Elle peut être obtenue très simplement en posant $v = iu$ dans

la solution soliton-antisoliton (2.30). Il est intéressant de noter au passage qu'une transformation similaire dans une solution soliton-soliton, ne permettrait pas d'obtenir une solution réelle ; cela correspond au fait qu'il n'existe pas d'état lié soliton-soliton puisque l'interaction est répulsive.

À partir de l'expression (2.33), on peut obtenir un breather en translation en effectuant la transformation de Lorentz suivante

$$x \longrightarrow \frac{x - vt}{\sqrt{1 - v^2/c_0^2}} \tag{2.34}$$

$$t \longrightarrow \frac{t - vx/c_0^2}{\sqrt{1 - v^2/c_0^2}} \quad . \tag{2.35}$$

La solution se propagera donc tout en oscillant.

La pulsation Ω du breather, donnée par l'expression

$$\Omega = \frac{\omega_0 u/c_0}{\sqrt{1 + u^2/c_0^2}} \quad , \tag{2.36}$$

se situe dans l'intervalle $[0, \omega_0]$, c'est-à-dire en dessous du spectre des phonons comme le montre la figure 2.11. Les breathers de faible amplitude et très étalés spatialement correspondent à des pulsations juste en-dessous de la bande de phonons, tandis que les breathers de grande amplitude ont des fréquences voisines de zéro ; la représentation de ces derniers à différents instants permet de reconnaître la paire de soliton-antisoliton qui oscille l'un par rapport à l'autre.

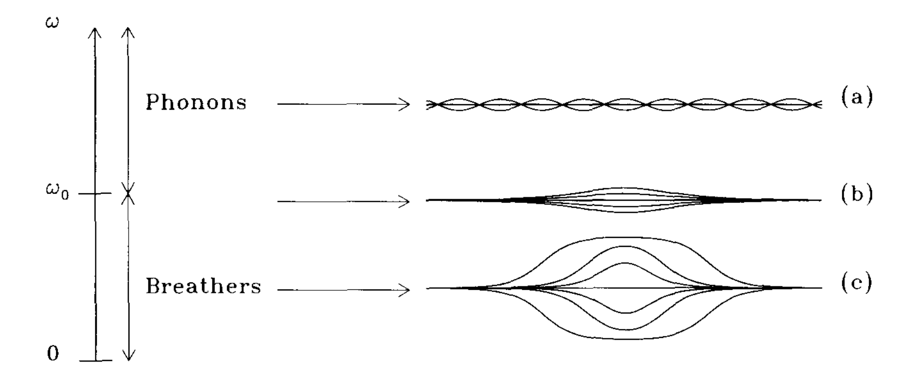


FIG. 2.11 – Spectre des solutions périodiques du modèle SG avec plusieurs exemples d'oscillations. (a) correspond à une solution phonon, délocalisée, (b) à un breather dont la fréquence se situe juste en-dessous du bas de la bande de phonons, alors que (c) correspond à une fréquence très faible.

Bien que mobiles, ces breathers ne sont pas des solutions se propageant sans déformation, puisqu'ils possèdent une oscillation interne. Ce sont cependant des solitons à part entière car :

- ils sont localisés spatialement puisque le breather oscille à l'intérieur de l'enveloppe définie par

$$E_{\text{env}}(x) = 4 \arctan \left[\frac{c_0}{u} \operatorname{sech} \left(\frac{\omega_0 x}{c_0} \frac{1}{\sqrt{1 + u^2/c_0^2}} \right) \right] \quad , \tag{2.37}$$

  de telle sorte que l'inégalité $|\theta_B(x,t)| \leq E_{\text{env}}(x)$ soit valable à tout instant,
- ils sont préservés dans les collisions avec d'autres breathers ou avec des solitons.

La définition première de solitons comme étant une « excitation localisée se propageant sans déformation » doit par conséquent être généralisée pour inclure les breathers ayant une oscillation interne. Nous en retrouverons un autre exemple dans le chapitre 3, lorsque nous étudierons l'équation de Schrödinger non-linéaire.

Les solutions *phonons* (ondes planes), *solitons* (ainsi que les antisolitons bien sûr) et *breathers* constituent *l'ensemble des solutions* du modèle SG sur lesquelles on peut par conséquent décomposer tout état du système. La méthode de diffusion inverse présentée dans le chapitre 7 montre que ces solutions variées constituent en quelque sorte les « modes normaux » non-linéaires du système puisque un état quelconque du système apparaît comme une combinaison de ces « modes »

$$\theta(x,t) = \widetilde{\sum} \text{phonons} + \widetilde{\sum} \text{solitons} + \widetilde{\sum} \text{breathers} \quad , \tag{2.38}$$

où nous avons symboliquement noté $\widetilde{\sum}$ une « somme non-linéaire » dont nous préciserons la nature dans le chapitre 7.

Origine du nom de l'équation de sine-Gordon

Après avoir établi en 1926 l'équation d'évolution de la fonction d'onde, ψ, d'une particule libre de masse m,

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 \psi \quad , \tag{2.39}$$

et qui porte désormais son nom, ERWIN SCHRÖDINGER (1887-1961) souhaitait obtenir une équation compatible avec la relativité restreinte, pour décrire notamment la dynamique d'électrons relativistes.

En considérant l'expression $\psi = \psi_0 e^{i(\omega t - \vec{p} \cdot \vec{r})}$ d'une onde, on est conduit à associer l'impulsion $\vec{p}$ à l'opérateur $-i\hbar\vec{\nabla}$ et l'énergie E à l'opérateur $i\hbar\partial/\partial t$. En utilisant ces transformations, l'équation de Schrödinger (2.39) conduit en effet à l'équation $E = \vec{p}^2/(2m)$ qui caractérise la dynamique classique. À partir de son équivalent relativiste

$$E^2 = \vec{p}^2 c^2 + m^2 c^4 \quad , \tag{2.40}$$

l'utilisation des lois de transformations conduit en revanche à l'équation

$$-\hbar^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = -\hbar^2 c^2 \vec{\nabla}^2 \psi + m^2 c^4 \psi \tag{2.41}$$

qui se réécrit sous la forme

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} - c^2 \vec{\nabla}^2 \psi + \omega_0^2 \psi = 0 \quad . \tag{2.42}$$

Cette équation porte désormais le nom d'équation de Klein-Gordon, car elle fut en effet publiée par OSKAR KLEIN (1894-1977) et WALTER GORDON (1893-1939). Il semble cependant qu'elle ait été obtenue auparavant par E. Schrödinger lui-même, mais qu'il ne la retint pas car elle n'expliquait pas les résultats expérimentaux de l'électron avec spin. Par extension, toute équation de ce type avec un dernier terme éventuellement non-linéaire, est appelée équation de Klein-Gordon.

L'équation de sine-Gordon (2.6) est obtenue en remplaçant le dernier terme de l'équation (2.42) par $\omega_0^2 \sin \psi$. Les consonances très voisines des prononciations anglaises de « Klein » et « sine » expliquent le nom porté par cette équation, qu'aucun M. Sine ne découvrit.

2.3 Étude des jonctions Josephson longues

Le cas des jonctions Josephson est un exemple où l'équation SG fournit une excellente description de la physique du dispositif. La dynamique des solitons dans une jonction longue peut en outre être observée directement et a été mise à profit pour réaliser différents dispositifs. Dans cette partie, nous allons décrire les principaux phénomènes physiques qui en sont à l'origine [22, 97, 117].

Une jonction tunnel Josephson est constituée de deux électrodes supraconductrices (généralement en niobium ou en aluminium) séparées par une mince couche d'isolant électrique en oxyde d'aluminium, de dix à cinquante angströms d'épaisseur (cf. fig. 2.12), pouvant être traversée par un courant tunnel, non dissipatif, d'origine quantique. La théorie de la jonction Josephson (et surtout des réseaux de jonctions) a été réactivée fortement par la découverte au milieu des années mille neuf cent quatre-vingt de la supraconductivité à haute température dans des céramiques comme $YBa_2Cu_3O_7$. En effet, les matériaux obtenus sont souvent constitués de micro-cristaux supraconducteurs en contact imparfait, chaque contact se comportant comme une jonction Josephson.

Pour comprendre le fonctionnement de la jonction Josephson, on peut se contenter de la théorie macroscopique, proposée par London en 1935 et complétée par la suite par Ginzburg et Landau en 1950. C'est d'ailleurs cette théorie macroscopique qui a été utilisée par Josephson au tout début des années 1960 dans sa thèse de doctorat [77]. Une description dans le cadre de

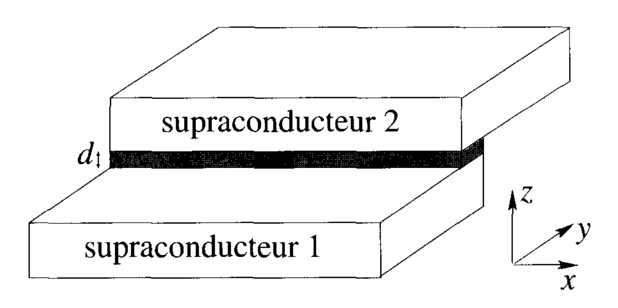


FIG. 2.12 – Représentation schématique d'une jonction tunnel Josephson. L'isolant est représenté par la zone en grisé. La jonction est étendue dans la direction x et de dimension négligeable dans la direction y.

la théorie microscopique de la supraconductivité classique (c'est-à-dire n'englobant pas les supraconducteurs ayant une haute température de transition puisque l'interprétation de cette forme de supraconductivité n'a toujours pas été établie de manière indiscutable) a été fournie par Bardeen, Cooper et Schrieffer (BCS)[4] en 1957. La supraconductivité est associée à la formation de paires de porteurs, appelées « paires de Cooper », qui sont des bosons de spin 1, formés à partir de deux électrons de spin 1/2.

2.3.1 Équation dynamique de la jonction

La présentation que nous donnons ici pour l'effet Josephson est due à Feynman [56]. Elle repose sur le fait qu'un supraconducteur est un *système quantique macroscopique* dans lequel l'ensemble des paires de Cooper est décrit par un seul état quantique (ou une seule fonction d'onde) $|\varphi\rangle$ qui est donc un « macro-état ». Le ket d'état, représentant les paires de Cooper dans le supraconducteur, est écrit sous la forme

$$|\psi\rangle = \left(\sqrt{\rho}\, e^{i\phi}\right)|\varphi\rangle \quad . \tag{2.43}$$

À l'intérieur des supraconducteurs, on ne considère que la dépendance en x et y (cf. fig. 2.12), ce qui revient à dire que le ket d'état représente un état intégré selon z sur l'épaisseur de chaque supraconducteur. Ainsi $\rho = \langle\psi|\psi\rangle$ représente la densité *surfacique* de paires dans le supraconducteur (intégration selon z de la densité volumique de charge) alors que ϕ est la phase.

L'effet Josephson

L'effet Josephson apparaît quand on augmente le couplage entre les deux supraconducteurs en réduisant la barrière qui les sépare. Lorsque la séparation

4. On peut trouver une présentation succincte de la théorie BCS dans le livre de Kittel [81] par exemple.

entre les deux supraconducteurs devient inférieure à environ 10 angströms, les paires de Cooper ont une probabilité significative de traverser l'isolant par effet tunnel. Les deux états $|\psi_1\rangle$ et $|\psi_2\rangle$ décrivant les paires de Cooper dans les deux supraconducteurs ne sont plus indépendants. On doit considérer le système des deux supraconducteurs comme un seul système quantique décrit par un nouveau ket d'état $|\Psi\rangle$. L'approche de Feynman consiste à admettre que $|\Psi\rangle$ est décrit complètement par son développement sur la base des macro-états $|\varphi_1\rangle$ et $|\varphi_2\rangle$, caractérisant les supraconducteurs 1 et 2 :

$$|\Psi\rangle = a_1|\varphi_1\rangle + a_2|\varphi_2\rangle \quad . \tag{2.44}$$

La jonction est donc vue comme un système de deux états imbriqués.

L'hamiltonien de la jonction dans la base $(|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle)$ s'écrit par conséquent

$$H = \begin{pmatrix} E_1 & K \\ K & E_2 \end{pmatrix} \quad , \tag{2.45}$$

où E_1 et E_2 représentent les énergies des paires dans les supraconducteurs S_1 et S_2, alors que K représente le couplage entre les deux supraconducteurs par effet tunnel. C'est un paramètre réel, caractéristique de la jonction et notamment de son épaisseur d'isolant.

L'équation d'évolution du ket d'état $|\Psi\rangle$ est fournie par l'équation de Schrödinger

$$i\hbar\frac{\partial|\Psi\rangle}{\partial t} = H|\Psi\rangle \quad , \tag{2.46}$$

qui s'écrit dans la base $(|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle)$

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}a_1}{\mathrm{d}t} = E_1a_1 + Ka_2 \tag{2.47}$$

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}a_2}{\mathrm{d}t} = E_2a_2 + Ka_1 \quad . \tag{2.48}$$

Si l'on applique une différence de potentiel V entre les deux supraconducteurs en prenant la référence de potentiel au milieu de la jonction, l'énergie des paires de Cooper est $E_1 = q(-V/2) = (2e)V/2 = eV$ pour le conducteur 1 (puisque la paire a une charge $(-2e)$ identique à celle de deux électrons) et celle des paires de Cooper du conducteur 2, porté au potentiel $+V/2$, est $-eV$. Le système (2.47) devient

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}a_1}{\mathrm{d}t} = eVa_1 + Ka_2 \tag{2.49}$$

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}a_2}{\mathrm{d}t} = -eVa_2 + Ka_1 \quad . \tag{2.50}$$

En notant $a_i = \sqrt{\rho_i}\ e^{i\phi_i}$, et en multipliant l'équation (2.49) par $\sqrt{\rho_1}$, on obtient

$$i\hbar\left[\frac{1}{2}\frac{\mathrm{d}\rho_1}{\mathrm{d}t}e^{i\phi_1} + i\rho_1\frac{\mathrm{d}\phi_1}{\mathrm{d}t}e^{i\phi_1}\right] = eV\rho_1e^{i\phi_1} + K\sqrt{\rho_1\rho_2}\,e^{i\phi_2} \quad . \tag{2.51}$$

En séparant partie imaginaire puis partie réelle, on aboutit à

$$\frac{\hbar}{2}\frac{\mathrm{d}\rho_1}{\mathrm{d}t}\cos\phi_1 - \hbar\rho_1\frac{\mathrm{d}\phi_1}{\mathrm{d}t}\sin\phi_1 = eV\rho_1\sin\phi_1 + K\sqrt{\rho_1\rho_2}\,\sin\phi_2 \tag{2.52}$$

$$-\frac{\hbar}{2}\frac{\mathrm{d}\rho_1}{\mathrm{d}t}\sin\phi_1 - \hbar\rho_1\frac{\mathrm{d}\phi_1}{\mathrm{d}t}\cos\phi_1 = eV\rho_1\cos\phi_1 + K\sqrt{\rho_1\rho_2}\,\cos\phi_2 \quad . \tag{2.53}$$

Si l'on multiplie l'équation (2.52) par $\cos\phi_1$ et l'équation (2.53) par $-\sin\phi_1$, leur somme conduit à

$$\frac{\hbar}{2}\frac{\mathrm{d}\rho_1}{\mathrm{d}t}\left(\cos^2\phi_1 + \sin^2\phi_1\right) = K\sqrt{\rho_1\rho_2}\,\left(\sin\phi_2\cos\phi_1 - \cos\phi_2\sin\phi_1\right) \quad . \tag{2.54}$$

En définissant la variable $\theta = \phi_2 - \phi_1$, on obtient finalement

$$\frac{\mathrm{d}\rho_1}{\mathrm{d}t} = \frac{2K}{\hbar}\sqrt{\rho_1\rho_2}\,\sin\theta \quad , \tag{2.55}$$

alors qu'un calcul similaire conduit à l'équation

$$\frac{\mathrm{d}\rho_2}{\mathrm{d}t} = \frac{2K}{\hbar}\sqrt{\rho_1\rho_2}\,\sin(\phi_1 - \phi_2) = -\frac{2K}{\hbar}\sqrt{\rho_1\rho_2}\,\sin\theta \quad . \tag{2.56}$$

On vérifie par conséquent que seule la différence de phase θ est importante, comme cela était attendu.

Comme ρ_1 et ρ_2 sont les densités de porteurs par unité de surface de jonction dans chaque supraconducteur, et que chaque porteur a la charge $2e$, les variations $\mathrm{d}\rho_1/\mathrm{d}t$ et $\mathrm{d}\rho_2/\mathrm{d}t$ sont associées à l'existence d'une densité de courant à travers l'isolant. Elle provient du passage des paires par effet tunnel à travers l'isolant. La densité de courant passant du supraconducteur 1 au supraconducteur 2 est dirigée selon z et vaut

$$j_T = -2e\frac{\mathrm{d}\rho_1}{\mathrm{d}t} = 2e\frac{\mathrm{d}\rho_2}{\mathrm{d}t} = -\frac{4eK}{\hbar}\sqrt{\rho_1\rho_2}\,\sin\theta \quad . \tag{2.57}$$

On notera $j_c = -4eK\sqrt{\rho_1\rho_2}/\hbar$, la densité de courant critique qui peut traverser la jonction par effet tunnel ; c'est une quantité déterminée par les caractéristiques géométriques de la jonction et par la densité de paires. On obtient donc l'expression

$$j_T = j_c\sin\theta \quad . \tag{2.58}$$

Par ailleurs, si l'on multiplie l'équation (2.52) par $\sin\phi_1$ et l'équation (2.53) par $\cos\phi_1$, on obtient

$$-\hbar\rho_1\frac{\mathrm{d}\phi_1}{\mathrm{d}t}\left(\sin^2\phi_1 + \cos^2\phi_1\right) = eV\rho_1\left(\sin^2\phi_1 + \cos^2\phi_1\right) + K\sqrt{\rho_1\rho_2}\left(\sin\phi_1\sin\phi_2 + \cos\phi_2\cos\phi_1\right) \tag{2.59}$$

qui se simplifie en

$$\frac{\mathrm{d}\phi_1}{\mathrm{d}t} = -\frac{eV}{\hbar} - \frac{K}{\hbar}\sqrt{\frac{\rho_2}{\rho_1}}\cos\theta \quad . \tag{2.60}$$

De manière similaire, on obtient également

$$\frac{\mathrm{d}\phi_2}{\mathrm{d}t} = \frac{eV}{\hbar} - \frac{K}{\hbar}\sqrt{\frac{\rho_1}{\rho_2}}\cos\theta \quad . \tag{2.61}$$

Pour deux supraconducteurs du même type, les deux densités de porteurs ρ_1 et ρ_2 sont sensiblement égales et en pratique contrôlées par un courant extérieur alimenté par un générateur (conventionnellement désigné par son nom anglais « bias current »). Par différence, les deux équations (2.60) et (2.61) conduisent donc à

$$\frac{\mathrm{d}\theta}{\mathrm{d}t} = \frac{2eV}{\hbar} \quad . \tag{2.62}$$

Les équations (2.58) et (2.62) sont les deux équations fondamentales obtenues par Josephson et connues [146] respectivement sous le nom d'effets Josephson continu et alternatif. Décrivant le passage à travers l'isolant d'un courant *de paires*, non dissipatif, d'amplitude j_c et de pulsation $\nu = 2eV/h$, elles ont été confirmées par de très nombreuses expériences.

Pour obtenir l'équation caractéristique de la jonction, il faut cependant les compléter par les équations de Maxwell dans l'isolant, matériau non magnétique,

$$\overrightarrow{\mathrm{rot}}\ \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \tag{2.63}$$

$$\overrightarrow{\mathrm{rot}}\ \vec{B} = \mu_0 \vec{j} + \mu_0 \varepsilon \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} \tag{2.64}$$

en notant le champ électrique, $\vec{E}$, le champ magnétique, $\vec{B}$, et ε la constante diélectrique de l'isolant. L'isolant étant non magnétique, sa perméabilité est égale à la perméabilité magnétique du vide μ_0.

Jonction « ponctuelle »

Si l'on considère une jonction quasi-ponctuelle, on peut ignorer la dépendance spatiale de la densité de courant dans le plan (x, y) de la jonction. La densité de courant totale $\overrightarrow{j_B}$ est imposée par le générateur extérieur, et crée un champ magnétique $\overrightarrow{B_0}$ tel que $\overrightarrow{\mathrm{rot}}\ \overrightarrow{B_0} = \mu_0 \overrightarrow{j_B}$. Étant donnés les axes précisés sur la figure 2.12, la densité de courant $\overrightarrow{j_B}$ sera dirigée selon l'axe z, de même que le champ $\vec{E} = (V/d)\overrightarrow{u_z}$.

La courant total qui traverse les jonctions Josephson *réelles* correspond en réalité à la somme de différentes contributions :

- le supercourant tunnel de paires dû à l'effet Josephson, $j_T = j_c \sin\theta$,
- une contribution de courant normal résistif, correspondant à l'effet tunnel des porteurs de charge habituels, les électrons non appariés qui subsistent en présence des paires de Cooper. Ce terme s'exprime comme $j_R = V/(RS)$, où l'on note R la résistance de l'isolant,

– la contribution $\varepsilon(\partial E)/(\partial t)$ correspondant au dernier terme de l'équation (2.64). Il traduit donc un courant capacitif, $(\varepsilon/d)V_t$, associé à la jonction, la capacité géométrique entre les deux électrodes s'exprimant de manière classique par $C = \varepsilon S/d$.

La projection selon z de ce courant conduit donc à

$$j_B = j_T + \frac{V}{RS} + \frac{C}{S}\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}t} \quad . \tag{2.65}$$

Cette description des jonctions Josephson réelles correspond en définitive à une jonction idéale court-circuitée par une résistance R et une capacité C, comme représentée sur la figure 2.13. C'est le modèle [146] RCSJ (« Resistively and Capacitively Shunted Junction » qui se traduit peu élégamment par « Jonction résistivement et capacitivement court-circuitée »).

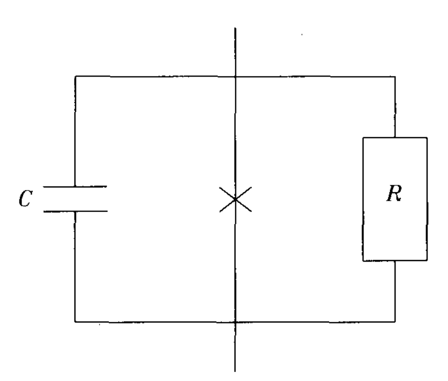


FIG. 2.13 – Circuit équivalent à une jonction Josephson réelle d'après le modèle RCSJ : une jonction Josephson idéale court-circuitée par une résistance R et une capacité C.

En utilisant les équations (2.58) et (2.62), on peut réécrire l'équation (2.65) sous la forme

$$j_B = j_c \sin\theta + \frac{1}{RS}\frac{\hbar}{2e}\frac{\mathrm{d}\theta}{\mathrm{d}t} + \frac{C}{S}\frac{\hbar}{2e}\frac{\mathrm{d}^2\theta}{\mathrm{d}t^2} \quad , \tag{2.66}$$

qui se simplifie en

$$\frac{\mathrm{d}^2\theta}{\mathrm{d}t^2} + \frac{1}{RC}\frac{\mathrm{d}\theta}{\mathrm{d}t} + \omega_0^2 \sin\theta = \frac{2eS}{C\hbar} j_B \quad , \tag{2.67}$$

en introduisant la fréquence $\omega_0 = \sqrt{2edj_c/(\hbar\varepsilon)}$.

On constate par conséquent qu'une jonction Josephson ponctuelle est décrite par la même équation que celle d'un pendule simple ! Cette constatation a bien évidemment fortement renouvelé l'intérêt de l'étude du pendule simple et de sa dynamique non-linéaire, d'autant plus que, dans certains régimes de

fonctionnement des jonctions, un bruit électrique très important a été observé : c'est une conséquence des phénomènes chaotiques de l'oscillateur non linéaire que constitue la jonction.

Jonction étendue

Outre les études de jonctions ponctuelles, de nombreuses expériences ont été faites avec des jonctions étendues dans une seule direction, que nous noterons x. On maintient la même densité de courant moyenne à travers la jonction mais θ et V dépendent maintenant de x et t.

La première équation de Maxwell (2.63) donne pour sa composante selon y

$$-\frac{\partial E_z}{\partial x} = -\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{V(x,t)}{d}\right) = -\frac{\partial B_y}{\partial t} \quad . \tag{2.68}$$

En utilisant l'équation (2.62), on obtient

$$\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\hbar}{2ed}\frac{\partial \theta}{\partial t}\right) = \frac{\partial B_y}{\partial t} \tag{2.69}$$

qui conduit par intégration par rapport au temps à

$$B_y = \frac{\hbar}{2ed}\frac{\partial \theta}{\partial x} + B_{0y}(x) \tag{2.70}$$

où $B_{0y}(x)$ est une constante d'intégration.

La projection du terme de gauche de la deuxième équation de Maxwell (2.64) sur l'axe z conduit à

$$\overrightarrow{u_z} \,.\, \overrightarrow{\mathrm{rot}}\, \overrightarrow{B} = \frac{\hbar}{2ed}\frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} + \mu_0 j_B \tag{2.71}$$

où l'on a désigné à nouveau par $\mu_0 j_B$ la composante selon z de $\overrightarrow{\mathrm{rot}}\, \overrightarrow{B_0}$, qui ne dépend pas du temps. La projection du terme de droite conduit à nouveau dans le cadre du modèle RCSJ à

$$\overrightarrow{u_z}.\left(\mu_0 \overrightarrow{j} + \mu_0 \varepsilon \frac{\partial \overrightarrow{E}}{\partial t}\right) = j_c \sin\theta + \frac{1}{RS}\frac{\hbar}{2e}\frac{\partial \theta}{\partial t} + \frac{C}{S}\frac{\hbar}{2e}\frac{\partial^2 \theta}{\partial t^2} \tag{2.72}$$

où l'on a simplement remplacé les dérivées par des dérivées partielles. En regroupant les équations (2.71) et (2.72), on aboutit à

$$\frac{\partial^2 \theta}{\partial t^2} - \frac{1}{\varepsilon \mu_0}\frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} + \frac{1}{RC}\frac{\partial \theta}{\partial t} + \frac{2eS}{C\hbar} j_c \sin\theta = \frac{2eS}{C\hbar} j_B \quad . \tag{2.73}$$

En définissant la quantité $c_0^2 = 1/(\varepsilon \mu_0)$, homogène au carré d'une vitesse, pour faire la correspondance avec l'équation SG telle que nous l'avions écrite, on voit que la jonction étendue est décrite par l'équation

$$\theta_{tt} - c_0^2 \theta_{xx} + \frac{1}{RC}\,\theta_t + \omega_0^2 \sin\theta = \frac{2eS}{C\hbar} j_B \quad . \tag{2.74}$$

La dynamique de la jonction Josephson est donc décrite par une équation SG perturbée que l'on étudiera plus précisément au chapitre 5.

Le calcul complet, c'est-à-dire sans tenir compte de l'approche « système à deux états » de Feynman, donne un résultat très voisin, mais le terme c_0^2 est trouvé égal à

$$c_0^2 = \frac{1}{\varepsilon\mu_0}\,\frac{d}{d+2\lambda_L} \quad \text{au lieu de} \quad c_0^2 = \frac{1}{\varepsilon\mu_0} \quad , \tag{2.75}$$

où la longueur de London λ_L correspond à la profondeur de pénétration du champ magnétique dans le supraconducteur. Le cas du supraconducteur parfait revient à supposer cette dernière égale à zéro. On ne peut cependant pas la négliger pour les supraconducteurs réels compte tenu de l'épaisseur d très faible de la couche d'isolant.

2.3.2 Applications aux propriétés d'une jonction Josephson longue

Dans le cas des fortes résistances R, on peut donc s'attendre à avoir dans la jonction des solitons de la forme

$$\theta(x,t) = 4\arctan\exp\left[\pm\frac{\omega_0}{c_0}\frac{x-vt}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c_0^2}}}\right] \quad . \tag{2.76}$$

Ces solitons existent même en présence de dissipation car leur mouvement est entretenu par le « bias current » j_B, comme nous le montrerons au chapitre 6. Mais pour qu'ils soient effectivement observables, il faut que leur largeur caractéristique $L = c_0/\omega_0 = \sqrt{\hbar/(\mu_0 2ed\,j_c)}$ soit compatible avec les dimensions de la jonction. La valeur de j_c est difficile à calculer car il faut connaître avec une extrême précision la géométrie de la jonction. Elle est en général mesurée expérimentalement et l'on trouve pour L des valeurs de l'ordre de 0,1 mm pour des jonctions typiques. Comme les jonctions utilisées ont des longueurs de l'ordre de $\ell = 1$ à 10 mm, la largeur du soliton est effectivement nettement inférieure à ℓ.

Supposons que l'on crée un soliton dans la jonction. Une impulsion de tension

$$V(x,t) = \frac{\hbar}{2e}\theta_t = \frac{\hbar}{2e}\frac{4\omega_0 v}{c_0\sqrt{1-\frac{v^2}{c_0^2}}}\,\mathrm{sech}\left[\frac{\omega_0}{c_0}\frac{x-vt}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c_0^2}}}\right] \tag{2.77}$$

se propage par conséquent dans la jonction et crée à ses bornes une tension

$$\overline{V} = \frac{1}{\ell}\int_{-\ell/2}^{\ell/2} V(x,t)\mathrm{d}x \tag{2.78}$$

correspondant à l'aire de l'impulsion $V(x,t)$. Comme celle-ci se propage comme un soliton, cette aire est une constante que nous noterons V_1.

Le courant total qui parcourt la jonction vaut

$$I = \frac{S}{\ell} \int_{-\ell/2}^{\ell/2} j_B \, \mathrm{d}x = \frac{\hbar}{2e\ell R} \int_{-\ell/2}^{\ell/2} \theta_t \, \mathrm{d}x = \frac{\overline{V}}{R} \tag{2.79}$$

puisque les autres termes de j_B se compensent si θ est solution de l'équation SG. On obtient donc un courant *continu*, proportionnel à $\overline{V} = V_1$, très faible puisqu'il s'annule dans la limite d'un isolant parfait.

On peut aussi envisager de créer deux solitons, trois solitons, etc., dans la jonction : $\overline{V}$ et I seront alors simplement multipliés par deux ou trois. La caractéristique expérimentale d'une jonction (cf. fig. 2.14) met nettement en évidence différents plateaux, dits « plateaux de Fiske », correspondants aux différentes valeurs des tensions. Le courant sur chaque plateau croît au delà des valeurs données par les solitons car une contribution de courant spatialement uniforme, imposée par le générateur de courant alimentant la jonction, s'ajoute au courant associé aux solitons.

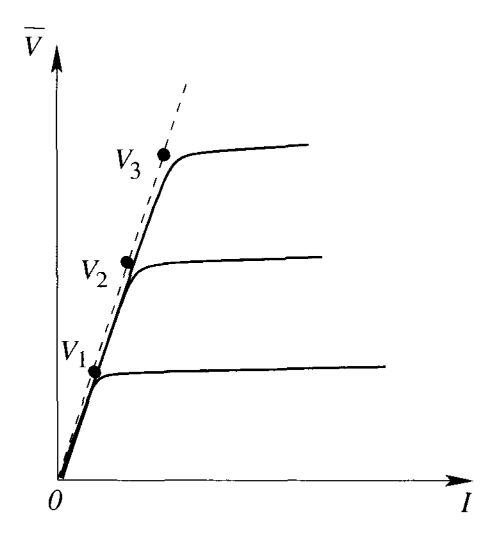


FIG. 2.14 – Schéma de la caractéristique expérimentale typique d'une jonction Josephson : la tension $\overline{V}$ aux bornes de la jonction est représentée en fonction du courant I qui la traverse. Les points correspondent aux valeurs des tensions et courants pour 1 soliton, 2 solitons, 3 solitons (équations (2.78) et (2.79)).

Outre la confirmation expérimentale par les « plateaux de Fiske », une preuve plus directe de l'existence des solitons provient de leur réflexion sur les extrémités de la jonction. L'analyse des conditions aux limites montre que l'extrémité apparaît comme une extrémité libre pour le soliton. L'arrivée en bout de jonction de l'impulsion de tension associée au soliton, puis sa réflexion, se traduit par une brusque augmentation de la tension locale. Par conséquent, bien que les valeurs totales de $\overline{V}$ et I pour la jonction soient

continues, on observe une rapide oscillation de la tension aux extrémités. En estimant la vitesse de propagation du soliton $c_0 = c/\sqrt{\varepsilon_r}$ à partir d'une valeur de la permittivité diélectrique relative de l'isolant $\varepsilon_r = 10$ et d'une longueur typique de jonction $\ell = 10$ mm, on obtient une fréquence $\nu = c_0 \ell \simeq 10$ GHz. La jonction dans laquelle oscille le soliton est par conséquent un *émetteur hyperfréquence* rayonnant des micro-ondes. Ces ondes très faciles à détecter fournissent une observation presque directe de l'existence du soliton.

Comme nous avons mis en évidence le caractère répulsif de l'interaction entre deux solitons, dans le cas où l'on excite deux solitons dans une jonction, ils devraient avoir tendance à se placer le plus loin possible l'un de l'autre, c'est-à-dire à la distance $\ell/2$ l'un de l'autre dans l'état stationnaire. Comme le montre la figure 2.15, la fréquence des impulsions de tension aux extrémités devrait alors être doublée. Comme l'expérience montrait que cela n'était pas le cas, il a été nécessaire d'étudier [97] l'équation SG perturbée qui décrit la jonction pour lever l'apparente contradiction entre théorie et expérience. En faisant un calcul plus complet, on constate qu'un terme θ_{xxt}, que notre étude simplifiée n'a pas donné, apparaît à cause de la diffusion des paires de Cooper par les interfaces des supraconducteurs. Bien que très faible, il a une importance déterminante sur la distribution des solitons : ils ont tendance à se regrouper en « peloton » (« soliton bunch »). Cet effet d'un terme pourtant très faible s'explique bien si l'on pense que les solitons ont un comportement de particules quasi-libres : leur énergie d'interaction, exponentiellement décroissante avec leur distance, est très faible lorsqu'ils sont séparés d'une distance supérieure à 5 ou 6 fois leur largeur. Même une très faible perturbation parvient à vaincre leur répulsion. C'est pourquoi l'émission de micro-ondes s'effectue toujours à la même fréquence qu'avec un seul soliton puisque les deux solitons arrivent quasiment ensemble aux extrémités de la jonction. L'existence de plusieurs solitons est seulement perçue par l'intensité de l'émission ainsi que par la mise en évidence de fréquences adjacentes à la fréquence fondamentale.

2.3.3 Signification physique du soliton : fluxon

Nous avons vu qu'il existait dans l'isolant une composante du champ magnétique

$$\overrightarrow{B_1}(x,t) = \frac{\hbar}{2ed}\frac{\partial\theta}{\partial x}\,\overrightarrow{u_y} \quad . \tag{2.80}$$

Le flux du champ magnétique correspondant à travers la jonction est par conséquent

$$\phi = \int B_1(x,t)\, d\,\mathrm{d}x = d\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\hbar}{2ed}\frac{\partial\theta}{\partial x}\,\mathrm{d}x = \frac{\hbar}{2e}\Big[\theta(x,t)\Big]_{-\infty}^{+\infty} \tag{2.81}$$

où l'on a étendu les bornes de l'intégrale jusqu'à l'infini puisque la longueur ℓ de la jonction est très supérieure à la largeur du soliton.

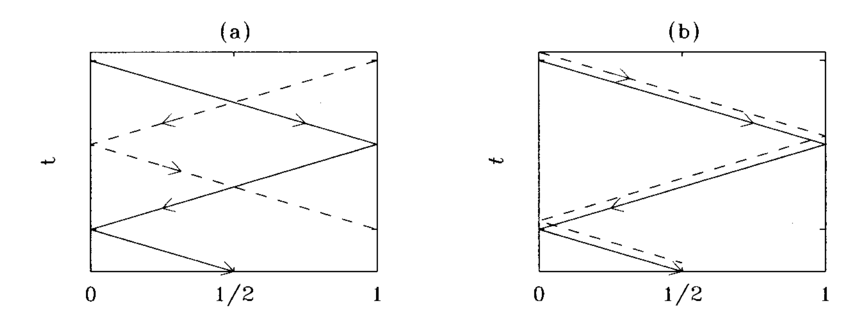


FIG. 2.15 – Représentation de la dynamique des solitons dans une jonction Josephson dans laquelle on a créé deux solitons (trait plein et trait interrompu). L'axe horizontal donne leur position dans la jonction (en unité de la longueur ℓ de la jonction) et l'axe vertical correspond au temps. On aura une impulsion de tension chaque fois qu'une trajectoire rencontre un des bords verticaux des figures, correspondant à une extrémité de la jonction. La figure (a) montre la prévision de l'équation SG. La figure (b) montre en revanche la prévision de l'équation SG perturbée par un terme θ_{xxt} : les deux solitons se sont regroupés.

Si l'on suppose que l'on a N solitons dans la jonction, on obtient par conséquent $\phi = N\phi_0$ où $\phi_0 = h/2e$. Ce flux est donc quantifié et le soliton peut alors être interprété comme un *quantum de flux magnétique* dans la jonction : on lui donne le nom de *fluxon*.

2.4 Autres exemples de solitons topologiques

L'équation SG (2.6) correspond à un exemple particulier de systèmes dont l'hamiltonien, de la forme

$$H = \int_{-\infty}^{+\infty} \left[\frac{1}{2}\phi_t^2 + \frac{1}{2}\phi_x^2 + V(\phi)\right] \mathrm{d}x \quad , \qquad (2.82)$$

conduit à une équation d'évolution qui s'écrit

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} - \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + V'(\phi) = 0 \quad . \qquad (2.83)$$

Dans le cas où le potentiel $V(\phi)$ possède plusieurs minima dégénérés, ces équations de Klein-Gordon non-linéaires admettent toujours des solutions à profil constant de type topologique qui relient ces différents minima.

Comme dans le cas particulier de l'équation SG, on peut profiter de l'invariance de Lorentz pour résoudre l'équation en cherchant seulement ses solutions statiques. Le calcul revient encore à étudier la dynamique d'une particule fictive dans le pseudo-potentiel $-V(\phi)$. De très nombreuses formes

de ce potentiel ont ainsi été considérées mais le potentiel sinusoïdal de l'équation SG se singularise par le fait qu'il est le seul qui conduise à un *système totalement intégrable* possédant des solutions solitons, alors que les autres cas correspondent à des *quasi-solitons*, que l'on appelle kinks (ils correspondent en effet à une variation rapide de la variable ϕ). Ces quasi-solitons ne ressortent pas inchangés de collisions avec d'autres kinks. Nous mentionnons ici deux exemples classiques.

2.4.1 Le modèle ϕ^4

Le potentiel $V(\phi) = \frac{1}{4}(\phi^2 - 1)^2$ représenté sur la figure 2.16 ne possède que deux minima dégénérés en $\phi_0 = \pm 1$. L'expression du kink reliant ces deux minima est

$$\phi = \pm \tanh \frac{x - vt}{\sqrt{2}\sqrt{1 - v^2}} \quad , \tag{2.84}$$

qui est solution de l'équation de Klein-Gordon correspondante,

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} - \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} - \phi + \phi^3 = 0 \quad . \tag{2.85}$$

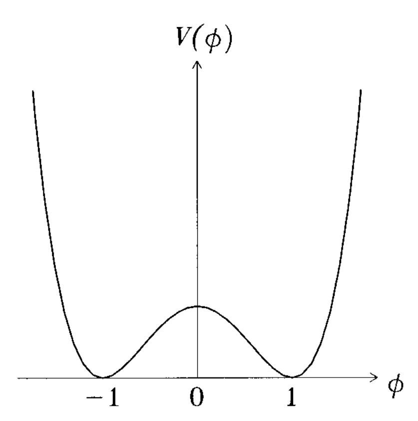


FIG. 2.16 – Allure du potentiel ϕ^4 d'expression $V(\phi) = \frac{1}{4}(\phi^2 - 1)^2$.

L'existence de seulement deux minima induit une *contrainte topologique supplémentaire* par rapport à l'équation SG : une solution multikinks doit correspondre à un basculement alternatif entre ces deux minima, par conséquent un anti-kink est nécessairement suivi d'un kink. Il est cependant important de noter que contrairement au cas de sine-Gordon, il n'existe pas de solution exacte multi-kink ; ainsi, la solution représentée sur la figure 2.17 n'est qu'une solution approchée. Elle est d'autant plus appropriée que les kinks sont distants les uns des autres.

Ce modèle ϕ^4 a été très souvent utilisé en physique. Sa première application majeure se trouve dans la théorie de Ginzburg-Landau des transitions

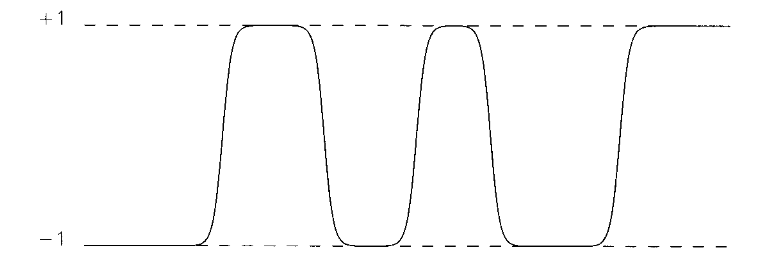


FIG. 2.17 – Solution multisolitons approchée du modèle ϕ^4, correspondant à une alternance de solitons et d'antisolitons.

de phase du deuxième ordre. Nous verrons aussi dans le chapitre 10 qu'il a été employé avec succès de façon plus microscopique pour décrire les parois de domaines dans les ferroélectriques. Les kinks décrivent alors des excitations fondamentales du système ayant une contribution très importante à la thermodynamique statistique. Ce modèle peut également décrire les défauts topologiques dans des polymères comme le polyacétylène (cf. chap. 13). Enfin, en théorie des champs, il a été proposé [39] comme modèle simple d'états stables différents de l'état du « vide ». Le grand intérêt du modèle ϕ^4 est que la forme polynomiale du potentiel permet de conduire de nombreux calculs de manière analytique.

2.4.2 Le modèle double sine-Gordon (DSG)

Ce modèle [37], correspondant au potentiel $V(\phi) = -\cos\phi + \eta\cos 2\phi$, est une extension naturelle du modèle SG car il revient à ajouter un second terme dans le développement de Fourier d'une fonction périodique. Il est en outre très intéressant car selon la valeur du paramètre η on obtient des topologies différentes du potentiel qui induisent des propriétés très particulières.

• Lorsque $\eta < -1/4$, le potentiel a l'allure présentée sur la figure 2.18(a). La méthode du potentiel effectif montre que le soliton ne peut relier que deux minima du potentiel, et qu'il doit donc correspondre à un passage de l'état $\phi = 0$ à l'état $\phi = \pm 2\pi$, ou bien l'inverse. L'existence des minima secondaires en $\phi = \pm\pi$ crée cependant une zone plus favorable énergétiquement que les valeurs voisines : le soliton a donc un aspect particulier et semble composé de deux « sous-solitons » liés (cf. fig. 2.19).

• Le cas intermédiaire $-\frac{1}{4} < \eta < \frac{1}{4}$ est en revanche très voisin du cas du potentiel de sine-Gordon puisque le potentiel a qualitativement la même forme avec simplement des maxima ou des minima plus plats.

• Enfin, le cas $\eta > \frac{1}{4}$ est à nouveau très intéressant, car il existe alors deux manières différentes de rejoindre les minima dégénérés énergétiquement situés en $\phi = \pm\phi_0 \pmod{2\pi}$ (cf. fig. 2.18(b)). Elles correspondent à *deux types de solutions kinks.* Si l'on se rappelle que l'énergie d'un kink est proportionnelle

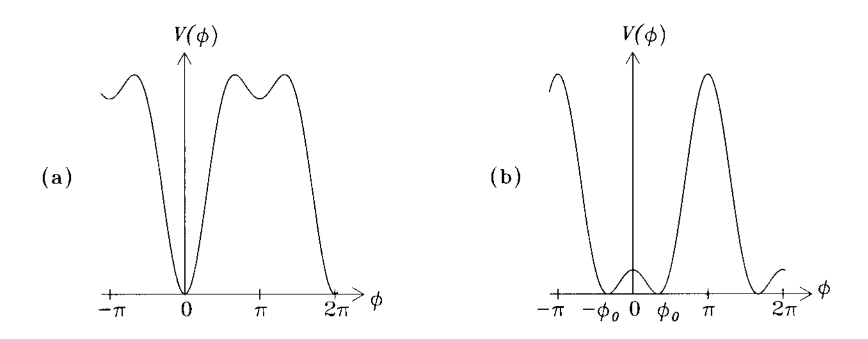


FIG. 2.18 – Allure du potentiel double sine-Gordon pour $\eta < -\frac{1}{4}$ (a) et $\eta > \frac{1}{4}$ (b).

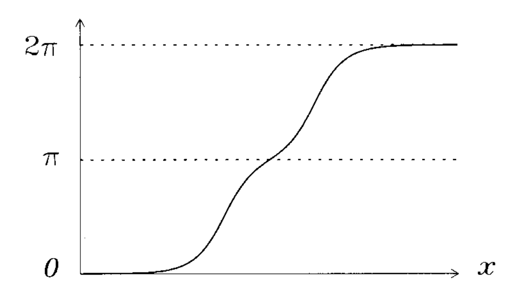


FIG. 2.19 – Allure de la solution à *un* soliton du modèle double sine-Gordon.

au résultat de l' intégration de $\sqrt{V(\phi)}$ entre les deux valeurs de ϕ qu'il relie, on remarque que *les deux types de kinks ont des énergies différentes* qui donnent lieu à des phénomènes nouveaux lors des collisions. Nous appellerons type II les solitons liant les minima en passant sur le maximum global. Leur énergie au repos E_0^{II} est donc supérieure à l'énergie E_0^I des autres solitons (type I) qui correspondent au passage au dessus du petit maximum secondaire.

En regardant la forme des vallées de potentiel, on peut observer que la collision entre un kink de type II et un antikink de type II génère un kink et un antikink de type I (cf. fig. 2.20). Si l'on fait un bilan énergétique de la collision dans ce système conservatif, on obtient

$$2E_0^{II} + 2T^{II} = 2E_0^I + 2T^I \tag{2.86}$$

où l'on a noté T^{II} et T^I les énergies cinétiques des kinks avant et après la collision. La condition $2E_{II} > 2E_I$ conduit à $T^I > T^{II}$ c'est-à-dire que la collision conduit à un transfert d'énergie potentielle en énergie cinétique. Les deux kinks de type I qui sont générés repartent par conséquent à très grande vitesse.

Le résultat de la collision entre un kink I et un antikink I dépend de leurs vitesses initiales. Si l'énergie initiale totale (combinant non seulement les énergies au repos du kink et de l'antikink mais aussi leurs énergies cinétiques)

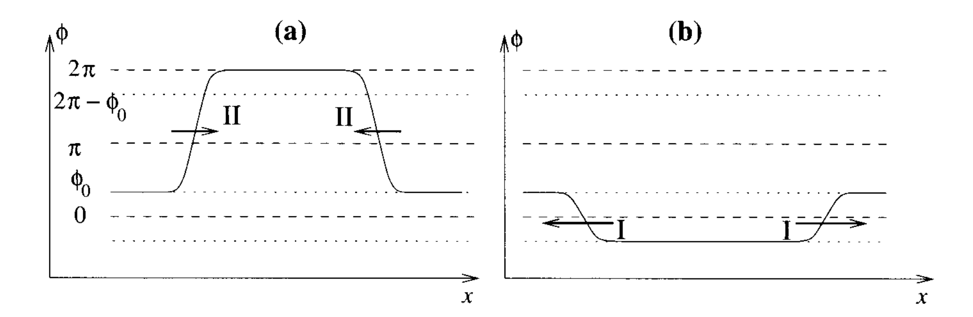


FIG. 2.20 – Schéma de la collision d'un soliton et d'un antisoliton de type II dans le modèle DSG avec $\eta > 1/4$. (a) Avant la collision, les deux excitations interpolent les valeurs ϕ_0 et $2\pi - \phi_0$. (b) Après la collision, la valeur de ϕ entre les deux excitations est passée à $-\phi_0$ (voir la figure correspondante dans le cas sine-Gordon (cf. fig. 2.8)). On a maintenant un soliton et un antisoliton de type I.

est inférieure à deux fois l'énergie au repos des kinks de type II

$$2E_0^I + 2T^I < 2E_0^{II} \quad , \tag{2.87}$$

la conversion est impossible et les deux excitations de type I sont réfléchies. Dans le cas opposé, on a formation d'une paire de kink-antikink de type II. Des simulations numériques précises [33] ont mis en évidence que le seuil de conversion est légèrement supérieur à deux fois l'énergie au repos des kinks de type II car les collisions ne sont pas élastiques et qu'il faut aussi tenir compte d'un faible rayonnement d'excitations de faibles amplitudes. Cela montre la limite du raisonnement qui consiste à traiter les solitons comme des quasi-particules lorsqu'on désire obtenir des résultats quantitatifs fins. Si l'on tient compte des possibilités de rayonnement de modes non localisés, on note que l'égalité (2.86) n'est qu'approchée. La situation se complique encore si l'on réalise que les kinks sont des objets complexes qui peuvent avoir des modes internes d'excitation (cf. la section 5.3). Un tel mode existe pour les kinks du modèle DSG et une partie de l'énergie peut y être transférée. Elle continue à se déplacer avec le kink et, comme elle est empruntée à son énergie cinétique de translation, la vitesse du kink est modifiée.

Le modèle DSG est encore suffisamment simple pour que toutes les solutions à un soliton puissent être obtenues analytiquement. Cependant, comme le modèle ϕ^4, il n'est pas totalement intégrable et ne possède donc pas de solutions multisolitons.

Les deux exemples que nous venons de décrire très brièvement donnent une idée de la richesse de comportement que l'on peut trouver avec les « solitons » topologiques. En réalité, c'est le fait que ce ne sont que des quasi-solitons (sauf le cas particulier de sine-Gordon) qui rend leur comportement plus riche et plus intéressant.

Chapitre 3

Solitons-enveloppe et localisation non-linéaire : l'équation de Schrödinger non-linéaire

Les systèmes que nous avons étudiés jusqu'à présent (ondes à la surface de l'eau, chaîne électrique, chaînes de pendules, etc.) possèdent également des solutions de faible amplitude sous la forme d'ondes planes

$$\theta = A\, e^{i(qx-\omega t)} + \text{c.c.} \quad , \tag{3.1}$$

fondamentalement différentes des solutions solitons que nous avons considérées (nous rappelons que le sigle c.c. correspond à l'abréviation de complexe conjugué). Il est donc légitime de se demander ce que deviennent les ondes planes lorsque l'on augmente suffisamment leur amplitude pour que la non-linéarité intervienne. La réponse que nous allons découvrir dans ce chapitre est que les ondes planes peuvent se moduler spontanément comme le montre la figure 3.1.

Cette modulation, qui provient des harmoniques apparues à cause de la non-linéarité, peut se poursuivre jusqu'à la coupure de l'onde initiale en « paquets » d'ondes (cf. fig. 3.1) dont les propriétés correspondent à celles des solitons. Ces solitons étant donc constitués d'une onde porteuse, modulée par un signal d'enveloppe, on leur donne le nom de *solitons-enveloppe*.

Nous allons montrer comment ils s'introduisent sur l'exemple simple de la chaîne de pendules étudiée au chapitre 2, puis nous verrons que l'équation qui les décrit est extrêmement générale en physique puisqu'elle apparaît naturellement dans la plupart des systèmes faiblement dispersifs et faiblement non-linéaires qui, à la limite des faibles amplitudes, sont décrits par une équation d'ondes.

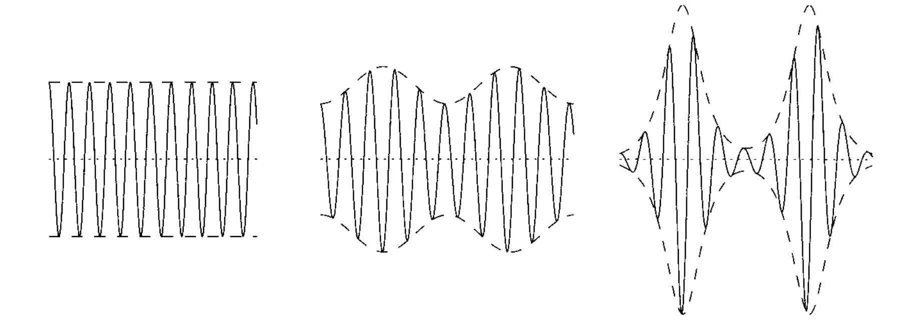


FIG. 3.1 – Modulation d'une onde plane. La courbe tiretée correspond à l'enveloppe de l'onde, représentée par la courbe continue. Les trois figures présentent trois états successifs de l'évolution de l'onde plane initiale.

3.1 Ondes non-linéaires dans la chaîne de pendules : l'équation de NLS

Considérons l'équation de la dynamique de la chaîne de pendules dans la limite des milieux continus (équation de SG) :

$$\theta_{tt} - c_0^2 \theta_{xx} + \omega_0^2 \sin\theta = 0 \quad . \tag{3.2}$$

Nous avons déjà vu au chapitre 2 que cette équation, dans la limite linéaire, admettait des solutions en ondes planes. Nous allons maintenant étudier le régime des amplitudes moyennes en considérant de faibles non-linéarités. Mathématiquement, cela signifie que nous n'allons tenir compte que du premier terme non-linéaire du développement de $\sin\theta$ dans l'équation (3.2) :

$$\sin\theta = \theta - \frac{\theta^3}{6} + \mathcal{O}(\theta^5) \quad . \tag{3.3}$$

Comme on se place dans le cas d'une faible non-linéarité, on pourrait penser à chercher la solution sous la forme d'un développement perturbatif dont le terme dominant serait l'onde plane, c'est-à-dire sous la forme

$$\theta = \varepsilon A \; e^{i(qx-\omega t)} + \varepsilon^2 B(x,t) \quad . \tag{3.4}$$

Cependant cette méthode ne peut donner de solution acceptable aux temps longs puisque l'on trouve que $B(x,t) \sim \varepsilon^2 t$, c'est-à-dire que la petite correction finit par diverger [113].

Il faut donc introduire une méthode permettant de contrôler ces divergences, que l'on appelle la *méthode des échelles multiples* et qui nous est suggérée par la forme de la solution, l'onde plane modulée (cf. fig. 3.1) qui

comporte plusieurs échelles de temps et d'espace :

- une variation rapide temporellement et spatialement au niveau de la porteuse,
- une variation beaucoup plus lente au niveau de l'enveloppe.

Le principe de la méthode est de chercher une solution qui dépend d'un ensemble de variables associées à ces différentes échelles : $T_i = \varepsilon^i t$ et $X_i = \varepsilon^i x$. On cherche donc θ sous la forme d'un développement perturbatif de fonctions de ces différentes variables

$$\theta(x,t) = \varepsilon \sum_{i=0}^{\infty} \varepsilon^i \; \phi_i(X_0, X_1, X_2, ..., T_0, T_1, T_2, ...) \tag{3.5}$$

qui sont traitées comme des variables *indépendantes*. On doit remplacer les opérateurs dérivées par des sommes d'opérateurs de la façon suivante

$$\frac{\partial}{\partial t} = \frac{\partial T_0}{\partial t}\frac{\partial}{\partial T_0} + \frac{\partial T_1}{\partial t}\frac{\partial}{\partial T_1} + \frac{\partial T_2}{\partial t}\frac{\partial}{\partial T_2} + \dots \tag{3.6}$$

$$= \frac{\partial}{\partial T_0} + \varepsilon\frac{\partial}{\partial T_1} + \varepsilon^2\frac{\partial}{\partial T_2} + \dots \quad . \tag{3.7}$$

La remarque essentielle est que toute solution de ce problème, *restreint à la ligne physique* ($T_0 = t\,;\ T_1 = \varepsilon t\,;\ T_2 = \varepsilon^2 t\,;\ T_3 = \varepsilon^3 t; ...$) sera solution du problème de départ. Hors de cette ligne physique, la solution n'a pas de signification physique. L'introduction des variables auxiliaires permet d'imposer les conditions adéquates de manière à éliminer les divergences et à construire un développement asymptotique uniformément convergent pour les valeurs faibles de ε.

En définissant la notation $D_i = \partial/\partial T_i$, on peut écrire

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} = (D_0 + \varepsilon D_1 + \varepsilon^2 D_2 + ...)^2 = D_0^2 + 2\varepsilon D_0 D_1 + \varepsilon^2(D_1^2 + 2D_0 D_2) + \dots \quad . \tag{3.8}$$

On note de manière analogue $D_{Xi} = \partial/\partial X_i$. Puis on reporte le développement (3.5), $\theta = \varepsilon\phi_0 + \varepsilon^2\phi_1 + \varepsilon^3\phi_2 + ...$, dans l'équation (3.2) en utilisant des expressions telles que (3.6) et (3.8) pour exprimer ses dérivées et identifier, comme dans un développement perturbatif classique, les différentes puissances de ε.

À **l'ordre** ε, on obtient l'équation suivante

$$(D_0^2 - c_0^2 D_{X0}^2 + \omega_0^2)\phi_0 = 0 \quad , \tag{3.9}$$

c'est-à-dire une équation linéaire en ϕ_0 que l'on notera $\hat{L}\;\phi_0 = 0$. La solution de l'équation (3.9) est l'onde plane

$$\phi_0 = A(X_1, T_1, X_2, T_2, ...)\; e^{i(qX_0 - \omega T_0)} + \text{c.c.} \quad , \tag{3.10}$$

dans laquelle ω et q sont liés par la relation de dispersion $\omega^2 = \omega_0^2 + c_0^2 q^2$ que l'on aurait également pu obtenir en linéarisant l'équation initiale (3.2).

Il existe cependant une différence importante avec la théorie des perturbations classiques puisque le facteur d'amplitude A n'est plus une constante mais une fonction qui dépend des autres échelles de temps et d'espace. Cette propriété donne des possibilités supplémentaires pour la solution, qu'il s'agit d'exploiter judicieusement. Au lieu d'essayer de résoudre l'équation non-linéaire en ajoutant un terme à la solution linéaire, on va adapter la solution linéaire elle-même, avant, éventuellement, de lui ajouter des termes correctifs supplémentaires.

À l'ordre ε^2, on trouve

$$D_0^2 \phi_1 + 2 D_0 D_1 \phi_0 - c_0^2 D_{X0}^2 \phi_1 - 2 c_0^2 D_{X0} D_{X1} \phi_0 + \omega_0^2 \phi_1 = 0 \tag{3.11}$$

qui peut se réécrire de la manière suivante

$$\hat{L}\ \phi_1 = -2 D_0 D_1 \phi_0 + 2 c_0^2 D_{X0} D_{X1} \phi_0 \tag{3.12}$$

$$= 2 i \omega \frac{\partial A}{\partial T_1} e^{i\sigma} + 2 i q c_0^2 \frac{\partial A}{\partial X_1} e^{i\sigma} + \text{c.c.} \quad , \tag{3.13}$$

en introduisant $\sigma = qX_0 - \omega T_0$ pour simplifier l'écriture. On obtient donc pour déterminer ϕ_1 une équation linéaire forcée par des termes en $e^{i\sigma}$ qui sont des termes *résonants* pour l'opérateur $\hat{L}$. Cette situation est analogue à l'exemple familier d'un simple oscillateur excité exactement à sa fréquence de résonance. Elle conduit à une réponse qui tend à croître linéairement dans le temps. Ce cas est aussi fréquemment rencontré en astronomie où de tels termes conduisent à une variation très lente des orbites : on les appelle termes séculaires. Pour que le développement ait un sens, il faut éviter cette situation. Ceci est possible en *imposant une condition* à l'amplitude A de manière à annuler les termes du second membre qui sont résonants pour l'opérateur $\hat{L}$. C'est ce que l'on appelle la condition de solvabilité, qui s'écrit ici

$$\frac{\partial A}{\partial T_1} + \frac{q c_0^2}{\omega} \frac{\partial A}{\partial X_1} = 0 \quad . \tag{3.14}$$

En reconnaissant que la quantité $v_g = q c_0^2 / \omega$ est la vitesse de groupe de l'onde porteuse $e^{i\sigma}$, on réalise que l'équation (3.14) signifie que l'amplitude A ne dépend pas de X_1 et T_1 séparément mais uniquement à travers la quantité $\xi_1 = X_1 - v_g T_1$. On a donc

$$A(X_1, T_1, X_2, T_2, ...) = A(X_1 - v_g T_1, X_2, T_2, ...) \quad . \tag{3.15}$$

Après annulation des termes séculaires, l'équation (3.12) se réduit à $\hat{L}\ \phi_1 = 0$ qui admet le solution $\phi_1 = 0$. Toute autre solution serait de la même forme que ϕ_0 et pourrait être incorporée dans A.

À l'ordre ε^3, on aboutit à l'équation

$$\hat{L}\,\phi_2 = -D_1^2\phi_0 - 2D_0D_2\phi_0 + c_0^2 D_{X1}^2\phi_0 + 2c_0^2 D_{X0}D_{X2}\phi_0 + \frac{\omega_0^2}{6}\phi_0^3 - 2D_0D_1\phi_1 + 2c_0^2 D_{X0}D_{X1}\phi_1 \quad . \tag{3.16}$$

C'est encore une équation linéaire forcée faisant toujours intervenir le même opérateur $\hat{L}$, qui pourrait à nouveau avoir un forçage résonant en raison de la présence de termes en $e^{i\sigma}$ dans le membre de droite. Il faut donc encore choisir la solution de manière à annuler ces termes séculaires, ce qui conduit à la condition

$$-\frac{\partial^2 A}{\partial T_1^2} + 2i\omega\frac{\partial A}{\partial T_2} + c_0^2\frac{\partial^2 A}{\partial X_1^2} + 2iqc_0^2\frac{\partial A}{\partial X_2} + \frac{3}{6}\omega_0^2|A|^2 A = 0 \quad , \tag{3.17}$$

en tenant compte de la condition $\phi_1 = 0$ obtenue à l'ordre ε^2 et en n'oubliant pas les termes résonants qui proviennent du développement de $\phi_0^3 = [A\exp(i\sigma) + A^*\exp(-i\sigma)]^3$.

Notons ici que si l'on avait fait le calcul de perturbation classique dans lequel A est une constante, il n'y aurait pas eu de termes résonants à l'ordre ε^2. En revanche, à l'ordre ε^3, ce développement perturbatif poserait un problème puisque le terme non-linéaire $|A|^2 A$ subsisterait à moins d'annuler purement et simplement la solution A. On trouverait que la solution particulière de l'équation

$$\hat{L}\,\phi_2 = \frac{\omega_0^2}{2}|A|^2 A\, e^{i\sigma} \tag{3.18}$$

est

$$\phi_2^p = \frac{i\omega_0^2}{4\omega}|A|^2 A\ T_2\, e^{i\sigma} e^{i(qX_2 - \omega T_2)} \quad , \tag{3.19}$$

qui est proportionnelle à la variable temporelle T_2, confirmant la croissance en $\varepsilon^2 t$ annoncée précédemment. Le développement perturbatif perdrait son sens puisque la « petite » perturbation finirait par diverger.

Après avoir annulé les termes séculaires, c'est-à-dire avoir précisé l'expression de A vérifiant l'équation (3.17), on trouve que ϕ_2 s'exprime en fonction de $e^{3i\sigma}$. La solution à l'ordre ε^3 est par conséquent du type

$$\theta = \varepsilon\left(A\ e^{i\sigma} + \text{c.c.}\right) + \varepsilon^3\left(B\ e^{3i\sigma} + \text{c.c.}\right) + \mathcal{O}(\varepsilon^4) + \dots \quad . \tag{3.20}$$

En fait, on se contente souvent de la solution au premier ordre puisqu'elle tient déjà compte de la non-linéarité grâce à la variation de l'amplitude A, régie par l'équation (3.17).

Notons enfin qu'il est possible de simplifier l'équation (3.17) en se plaçant, comme à l'ordre ε, dans le repère mobile à la vitesse v_g. En introduisant les variables $\xi_i = X_i - v_g T_i$ et $\tau_i = T_i$, soit

$$\frac{\partial A}{\partial T_i} = \frac{\partial A}{\partial \tau_i} - v_g\frac{\partial A}{\partial \xi_i} \quad \text{et} \quad \frac{\partial A}{\partial X_i} = \frac{\partial A}{\partial \xi_i} \quad , \tag{3.21}$$

on obtient

$$\frac{\partial A}{\partial \tau_1} = 0 \qquad (3.22)$$

en tenant compte de la condition (3.14), ce qui conduit aux égalités

$$\frac{\partial A}{\partial T_1} = -v_g \frac{\partial A}{\partial \xi_1} \quad \text{et} \quad \frac{\partial^2 A}{\partial T_1^2} = v_g^2 \frac{\partial^2 A}{\partial \xi_1^2} \quad . \qquad (3.23)$$

Dans le repère mobile, l'équation (3.17) peut donc s'écrire

$$(c_0^2 - v_g^2)\frac{\partial^2 A}{\partial \xi_1^2} + 2i\omega\left(\frac{\partial A}{\partial \tau_2} - v_g \frac{\partial A}{\partial \xi_2}\right) + 2iqc_0^2 \frac{\partial A}{\partial \xi_2} + \frac{1}{2}\omega_0^2 |A|^2 A = 0 \quad . \qquad (3.24)$$

En utilisant la valeur de la vitesse de groupe $v_g = qc_0^2/\omega$, les termes en $\partial A/\partial \xi_2$ s'annulent et il reste après division par 2ω,

$$i\frac{\partial A}{\partial \tau_2} + \frac{(c_0^2 - v_g^2)}{2\omega}\frac{\partial^2 A}{\partial \xi_1^2} + \frac{\omega_0^2}{4\omega}|A|^2 A = 0 \quad , \qquad (3.25)$$

que l'on appelle équation de Schrödinger non-linéaire (NLS) et qui décrit l'évolution de l'enveloppe A.

Nous avons fait le calcul en partant de l'équation de sine-Gordon (SG), c'est-à-dire de l'équation obtenue après l'approximation des milieux continus, valable pour des ondes porteuses de grandes longueurs d'ondes. Il est cependant possible de faire un calcul analogue à partir des équations discrètes

$$\frac{\mathrm{d}^2 \theta_n}{\mathrm{d}t^2} - c_0^2(\theta_{n+1} + \theta_{n-1} - 2\theta_n) + \omega_0^2 \sin\theta_n = 0 \qquad (3.26)$$

en conservant la porteuse discrète et régie par la relation de dispersion $\omega^2 = \omega_0^2 + 4c_0^2 \sin^2(q/2)$ et en faisant l'approximation des milieux continus seulement pour l'enveloppe. On obtient alors une équation de NLS dont les coefficients dépendent du vecteur d'onde q de la porteuse. Ce calcul [132] correspond à l'*approximation semi-discrète* qui est présentée dans la section 15.2.2.

3.2 Propriétés de l'équation de NLS

Écrivons l'équation (3.25) avec sa notation usuelle

$$i\frac{\partial \psi}{\partial t} + P\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + Q|\psi|^2\psi = 0 \quad , \qquad (3.27)$$

où P et Q sont des coefficients qui dépendent du problème considéré de même que la signification des variables t et x. Le nom de l'équation est évidemment lié à sa structure, très similaire à celle de l'équation de Schrödinger

$$i\frac{\partial \psi}{\partial t} = \left[-P\frac{\partial^2}{\partial x^2} - Q|\psi|^2\right]\psi \quad . \qquad (3.28)$$

Pour que l'équation (3.27) soit formellement analogue à *l'équation de Schrödinger*, il faut que le coefficient P soit positif. En fait, on peut toujours se ramener à ce cas. En effet, si $P < 0$, il suffit de changer le signe de l'équation et de prendre le complexe conjugué de l'équation de manière à changer le signe devant la dérivée temporelle pour parvenir à une équation pour ψ^* dans laquelle le coefficient de $\partial^2\psi^*/\partial x^2$ est positif. On pourra donc, sans restriction, se limiter au cas P positif. Notons que la transformation qui permet de se ramener à ce cas ne change pas le signe du produit PQ (qui, comme nous le verrons, a une importance déterminante sur la forme des solutions) car elle change simultanément les signes de P et Q.

Le terme correspondant au « potentiel » de l'équation de Schrödinger étant égal à $-Q|\psi|^2$, il dépend de la solution ψ, ce qui explique la dénomination *non-linéaire*.

Nous verrons que, lorsque le paramètre Q est positif, la solution pour ψ est localisée, en forme de cloche. Cela correspond à un « puits de potentiel » pour le terme $-Q|\psi|^2$, qui est justement une condition nécessaire[1] pour avoir une solution *localisée* spatialement de l'équation de Schrödinger. Ainsi l'équation de NLS est telle que ψ « creuse son propre puits de potentiel ». On a un phénomène d'autofocalisation (appelé aussi « self-trapping »). C'est un effet essentiel du point de vue physique, puisqu'il met en évidence la possibilité de localisation par effet non-linéaire, phénomène totalement différent de celui de la localisation due au désordre, fréquemment rencontrée en physique et généralement appelée localisation d'Anderson.

3.2.1 La solution soliton de l'équation de NLS

L'équation de NLS étant complexe, on cherche une solution sous la forme

$$\psi = \phi(x,t)\ e^{i\theta(x,t)} \tag{3.29}$$

où ϕ et θ sont des fonctions *réelles*. En choisissant convenablement le facteur de phase θ, on peut se restreindre aux valeurs positives pour l'amplitude ϕ.

En reportant cet ansatz dans l'équation de NLS (3.27), et en séparant parties réelle et imaginaire, on obtient le système d'équations suivant :

$$-\phi\ \theta_t + P\phi_{xx} - P\phi\ \theta_x^2 + Q\phi^3 = 0 \tag{3.30}$$

$$\phi_t + P\phi\ \theta_{xx} + 2P\phi_x\ \theta_x = 0 \quad . \tag{3.31}$$

Nous allons chercher une solution particulière dont la porteuse θ se propage à la vitesse u_p en gardant sa forme et l'enveloppe ϕ se propage à la vitesse u_e en gardant également sa forme. C'est-à-dire que nous cherchons une solution sous la forme

$$\phi(x,t) = \phi(x - u_e t) \quad \text{et} \quad \theta(x,t) = \theta(x - u_p t) \quad . \tag{3.32}$$

1. C'est même une condition nécessaire et suffisante lorsque l'on résout l'équation de Schrödinger à *une* dimension et que le potentiel est négatif.

4.13. Définition **(du défaut).** — Soit $\mathscr{E}$ un fibré de rang d sur $\mathbb{P}^1$ de type $a_1 \geqslant \cdots \geqslant a_d$. Le *défaut* de E est l'entier $\delta(E) = \sum_{i=1}^{d}(a_1 - a_i)$.

Le défaut est un entier $\geqslant 0$ et le fibré E est « zéro défaut » si et seulement s'il est quasi trivial.

4.14. Corollaire **(un critère de diminution du défaut).** — *Si $L^o \subset E_{m^o}$ n'est pas contenue dans $(F^{a_1})_{m^o}$, on a $\delta(E) > 0$ et $\delta(E(L^o m^o)) = \delta(E) - 1$.*

Démonstration. — L'énoncé résulte immédiatement du fait que l'on a $a_1 > a_{j(L^o)}$. □

4.d. Fibrés vectoriels algébriques et rationnels. — En utilisant la topologie de Zariski à la place de la topologie usuelle sur $\mathbb{P}^1$, on obtient la catégorie des fibrés vectoriels algébriques (au lieu de « holomorphes ») et rationnels (au lieu de « méromorphes »). Le foncteur qui associe à tout tel fibré son « analytisé » est une équivalence entre ces catégories algébriques et les catégories holomorphes correspondantes (*cf.* [**Ser56**]).

Dans le cadre algébrique, les fibrés admettent une description assez simple en termes de cocycles. Notons comme plus haut U_0 la carte de $\mathbb{P}^1$ de coordonnée t centrée en 0 et U_∞ la carte de coordonnée t' centrée en ∞.

Rappelons la correspondance (*cf.* [**Ser55**] et § 0.10.a) sur un ouvert affine U :

$$\text{Fibrés sur } U \iff \text{Modules libres de rang fini sur } \mathbb{C}[U]$$

où $\mathbb{C}[U]$ désigne l'anneau des fonctions régulières sur U, c'est-à-dire, si par exemple U est contenu dans U_0, l'anneau des fractions rationnelles en t qui ont des pôles dans $U_0 \smallsetminus U$.

Tout fibré vectoriel algébrique sur $\mathbb{P}^1$ peut alors être représenté par un cocycle relatif au recouvrement (U_0, U_∞), c'est-à-dire un élément de $\mathrm{GL}_d(\mathbb{C}[t, t^{-1}])$.

Les fibrés rationnels qui n'ont de pôles qu'en 0 et ∞ sont aussi les fibrés algébriques sur l'ouvert affine $U_0 \cap U_\infty$, c'est-à-dire les modules libres de rang fini sur l'anneau $\mathbb{C}[t, t^{-1}]$ des polynômes de Laurent.

4.15. Proposition. — *Soit $\mathbb{M}$ un fibré rationnel de rang d sur $\mathbb{P}^1$ à pôles en 0 et ∞ (*i.e.* un $\mathbb{C}[t, t^{-1}]$-module libre de rang d).*

(1) *Les réseaux de $\mathbb{M}$ correspondent aux couples $(\mathbb{E}_0, \mathbb{E}_\infty)$, où $\mathbb{E}_0$ (resp. $\mathbb{E}_\infty$) est un $\mathbb{C}[t]$ (resp. $\mathbb{C}[t']$)-module libre de rang d contenu dans $\mathbb{M}$, tels que*

$$\mathbb{C}[t, t^{-1}] \underset{\mathbb{C}[t]}{\otimes} \mathbb{E}_0 = \mathbb{M} \quad \textit{et} \quad \mathbb{C}[t', t'^{-1}] \underset{\mathbb{C}[t']}{\otimes} \mathbb{E}_\infty = \mathbb{M}$$

avec $t' = t^{-1}$.

(2) *Les propriétés suivantes sont équivalentes :*
   (a) *le réseau correspondant à* $(\mathbb{E}_0, \mathbb{E}_\infty)$ *est trivial;*
   (b) *on a dans* $\mathbb{M}$ *la décomposition* $\mathbb{E}_\infty = (\mathbb{E}_0 \cap \mathbb{E}_\infty) \oplus t'\mathbb{E}_\infty$ *;*
   (c) *on a dans* $\mathbb{M}$ *la décomposition* $\mathbb{E}_0 = (\mathbb{E}_0 \cap \mathbb{E}_\infty) \oplus t\mathbb{E}_0$ *;*
   (d) *on a* $\mathbb{M} = \mathbb{E}_0 \oplus t'\mathbb{E}_\infty$ *ou encore* $\mathbb{M} = \mathbb{E}_\infty \oplus t\mathbb{E}_0$.

Démonstration. — Indiquons seulement pourquoi l'une des décompositions (b) ou (c) implique la trivialité du réseau $\mathbb{E}$ associé à $(\mathbb{E}_0, \mathbb{E}_\infty)$. Le reste est laissé en exercice.

On identifie d'abord $\Gamma(\mathbb{P}^1, \mathbb{E})$ à $\mathbb{E}_0 \cap \mathbb{E}_\infty$. L'existence de la décomposition (b) signifie que l'application naturelle de restriction $\Gamma(\mathbb{P}^1, \mathbb{E}) \to i_\infty^* \mathbb{E}$ est un isomorphisme. Le théorème de Birkhoff-Grothendieck (dans sa version algébrique), joint à l'exercice 2.3-(4), permet de conclure que le fibré $\mathbb{E}$ est nécessairement trivial. □

5. Familles de fibrés vectoriels sur $\mathbb{P}^1$

5.a. Premières propriétés. — Soit X une variété analytique complexe, que nous supposerons toujours *connexe* dans la suite. Une *famille* de fibrés holomorphes sur $\mathbb{P}^1$ paramétrée par X est, par définition, un fibré holomorphe E sur la variété $M = \mathbb{P}^1 \times X$. Pour tout $x \in X$, on peut alors considérer la restriction E_x du fibré E à la sous-variété $\mathbb{P}^1 \times \{x\} = \mathbb{P}^1$ (*cf.* § 0.3.3). Chaque fibré E_x admet un type $a_1(x) \geqslant \cdots \geqslant a_d(x)$. Puisque ce type est formé d'entiers, on peut imaginer qu'il reste constant lorsque x varie dans un ouvert dense de X. Tel est bien le cas. Plus précisément, on peut montrer (voir par exemple [**Bru85**]), qu'il existe une stratification de X à type de E_x constant : il existe une partition de X en sous-variétés analytiques complexes (pas nécessairement fermées) au-dessus desquelles la restriction de E est de type constant; l'adhérence de chacune de ces sous-variétés est un sous-ensemble analytique fermé de X (éventuellement singulier) ; la frontière topologique d'une sous-variété de la famille est une réunion d'autres sous-variétés de la famille.

Notons que toutes les « dégénérescences » ne sont pas possibles. Le corollaire 5.4 ci-dessous montre par exemple que, si en un point de X le type est celui du fibré trivial, c'est encore le cas pour tout autre point assez proche du premier. De plus, il y a une contrainte simple sur le type des fibrés E_x pour $x \in X$ (*cf.* par exemple [**BS77**, chap. 3, th. 4.12] pour le cas analytique complexe et [**Har80**] pour le cas algébrique) :

On obtient finalement la solution suivante pour l'équation de NLS

$$\psi(x,t) = \phi_0 \operatorname{sech}\left[\sqrt{\frac{Q}{2P}}\,\phi_0(x-u_e t)\right] e^{i\frac{u_e}{2P}(x-u_p t)} \tag{3.42}$$

$$\text{avec} \quad \phi_0 = \sqrt{\frac{u_e^2 - 2u_e u_p}{2PQ}}, \quad PQ > 0 \quad \text{et} \quad u_e^2 - 2u_e u_p \geq 0 \quad . \tag{3.43}$$

Notons qu'on n'obtient pas de solution pour $u_e = u_p$, ce qui signifie qu'il n'est pas possible d'obtenir une solution à profil constant pour l'équation NLS comme cela avait été possible pour les équations KdV ou SG. On peut aussi écrire la solution sous la forme

$$\psi = \phi_0 \operatorname{sech}\left(\frac{x-u_e t}{L_e}\right) e^{i(\kappa x - \mu t)} \quad , \tag{3.44}$$

avec

$$L_e = \frac{1}{\phi_0}\sqrt{\frac{2P}{Q}}, \quad \kappa = \frac{u_e}{2P} \quad \text{et} \quad \mu = \frac{u_e u_p}{2P} \quad , \tag{3.45}$$

qui met en évidence que la solution de NLS a elle-même la forme d'un paquet d'ondes de largeur L_e inversement proportionnelle à l'amplitude ϕ_0. Par conséquent, lorsque son amplitude diminue, sa largeur augmente et l'on retrouve donc bien l'idée que la localisation de la solution est due à la non-linéarité. Dans la limite des faibles amplitudes (limite linéaire), on obtient ainsi une solution infiniment étendue, l'onde plane.

Notons également que si l'on considère une solution de faible amplitude de l'équation NLS ($\phi_0 \approx \varepsilon$), l'équation (3.45) conduit à $u_e \approx \varepsilon$ et $u_p \approx \varepsilon$. On constate alors que, dans la solution, les termes en x sont affectés soit d'un facteur ϕ_0 soit d'un facteur u_e, c'est-à-dire d'ordre ε tandis que les termes en t sont affectés des coefficients $\phi_0 u_e$ ou $u_e u_p$ qui sont d'ordre ε^2. On retrouve les ordres de grandeur auxquels avait conduit l'obtention de l'équation NLS par le développement en échelles multiples à partir de l'équation SG puisqu'on parvenait à une équation en ξ_1 et τ_2.

3.2.2 La localisation de l'énergie par instabilité modulationnelle

Nous venons de voir que l'équation de NLS possède une solution localisée de type soliton dans le cas où ses coefficients vérifient la condition $PQ > 0$. En fait, cette condition correspond à une situation dans laquelle l'énergie tend à se localiser spontanément dans le système grâce au phénomène d'instabilité modulationnelle.

En effet, outre la solution soliton, l'équation de NLS possède une solution en onde plane, mais celle-ci n'est pas toujours stable. Si l'on reporte la solution

$\psi(x,t) = A_0 e^{i(\kappa x - \Omega t)}$ dans l'équation de NLS (3.27), on constate que c'est une solution exacte si la pulsation Ω vérifie la relation de dispersion

$$\Omega = P\kappa^2 - QA_0^2 \quad . \tag{3.46}$$

Cette relation constitue la *relation de dispersion non-linéaire* de l'onde plane qui met en évidence que sa pulsation dépend non seulement de son vecteur d'onde, mais aussi de son amplitude A_0 (fig. 3.3). Comme nous allons le voir, cette solution, qui existe quel que soit le signe du produit PQ, n'est stable que si $PQ < 0$.

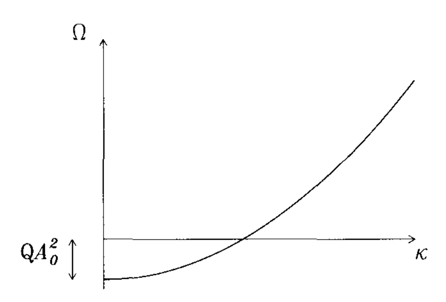


FIG. 3.3 – Relation de dispersion non-linéaire de l'équation de NLS.

Pour le vérifier, étudions sa stabilité linéaire en cherchant quelle est l'évolution temporelle d'une petite perturbation de sa phase et de son amplitude. On reporte dans l'équation de NLS l'expression suivante :

$$\psi(x,t) = [A_0 + b(x,t)]\, e^{i[\kappa x - \Omega t + \theta(x,t)]} \quad , \tag{3.47}$$

où b et θ sont deux fonctions réelles des variables x et t. En ne conservant que les termes linéaires en b et θ qui sont supposés petits, puis en séparant les parties réelle et imaginaire, et en tenant compte des termes qui s'éliminent grâce à la relation de dispersion (3.46) qui apparaît en facteur de $A_0 + b$ dans l'expression que l'on obtient, on parvient au système linéaire suivant :

$$-A_0\,\theta_t + Pb_{xx} - 2PA_0\kappa\,\theta_x + 2QA_0^2\,b = 0 \tag{3.48}$$

$$b_t + PA_0\,\theta_{xx} + 2P\kappa\,b_x = 0 \quad , \tag{3.49}$$

qui admet des solutions de la forme

$$b = b_0 e^{i(\delta x - \nu t)} + \text{c.c.} \quad \text{et} \quad \theta = \theta_0 e^{i(\delta x - \nu t)} + \text{c.c.} \quad . \tag{3.50}$$

En effet, en reportant ces solutions dans les équations (3.48) et (3.49), on note que le système est bien satisfait pourvu que l'on impose des relations liant b_0 et θ_0

$$(2QA_0^2 - P\delta^2)b_0 + iA_0(\nu - 2P\kappa\delta)\theta_0 = 0 \tag{3.51}$$

$$-i(\nu - 2P\kappa\delta)b_0 - PA_0\delta^2\theta_0 = 0 \quad . \tag{3.52}$$

Ce système homogène n'aura de solution non nulle pour b_0 et θ_0 qu'à la condition que son déterminant soit nul, ce qui donne la relation de dispersion de la perturbation

$$(\nu - 2P\kappa\delta)^2 = P^2\delta^2 \left(\delta^2 - \frac{2Q}{P}A_0^2\right) \quad . \tag{3.53}$$

On note immédiatement que le comportement de ν pour un vecteur d'onde donné δ dépend du signe de Q/P.

- Si $Q/P < 0$ (soit $PQ < 0$), $(\nu - 2P\kappa\delta)^2$ est égal à un terme positif quelles que soient les valeurs δ. En résolvant pour ν on trouve une valeur réelle qui indique que les perturbations b et θ oscillent en conservant une amplitude maximale constante. L'onde plane (3.47) solution de NLS est donc *stable* pour $PQ < 0$. On dit que l'on a stabilité marginale ; les perturbations conservent une amplitude constante, sans s'atténuer.
- Si $Q/P > 0$ ($PQ > 0$), il existe un domaine du vecteur d'onde δ de la perturbation pour lequel $(\nu - 2P\kappa\delta)^2$ est négatif. Dans cette région, on a alors

$$\nu = 2P\kappa\delta \pm i|P\delta|\sqrt{\frac{2Q}{P}A_0^2 - \delta^2} \tag{3.54}$$

  et ν comporte par conséquent une partie imaginaire non nulle ; le terme en $e^{-i\nu t}$ conduit à une croissance exponentielle de la perturbation et l'onde plane est *instable*. Elle a tendance à se moduler avec le vecteur d'onde correspondant à la valeur de δ donnant le taux de croissance $\mathrm{Im}(\nu)$ maximal, c'est-à-dire $\delta = A_0\sqrt{Q/P}$ comme le montre la figure 3.4. Ce phénomène d'instabilité modulationnelle correspond à une *localisation d'énergie induite par la non-linéarité* puisque l'on note que le taux de croissance maximal, $|Q|A_0^2$, est d'autant plus grand que le coefficient mesurant la non-linéarité Q est grand ou que l'amplitude de l'onde A_0 est grande. On peut noter que le taux de croissance de l'instabilité d'une onde dépend seulement de son amplitude A_0 mais non de son vecteur d'onde κ (ou de sa pulsation Ω).

Dans le cas $PQ > 0$, qui correspond au domaine d'existence des solitons, l'étude de l'évolution à long terme d'une onde plane injectée dans le système montre que, après la phase de modulation résultant de la croissance de la petite perturbation, que l'on peut déduire de l'analyse de stabilité linéaire, le même type d'évolution se poursuit au point que l'amplitude de l'onde s'annule complètement dans certaines zones. On obtient un train de solitons, qui s'est formé spontanément par *instabilité modulationnelle* de l'onde. On vérifie donc à nouveau que, dans leur domaine d'existence, les solitons sont les excitations stables du système et qu'ils se forment spontanément. Cette instabilité d'une onde plane est parfois appelée instabilité de Benjamin-Feir, en l'honneur de ceux qui l'ont découverte pour les trains de vagues à la surface de l'eau [24].

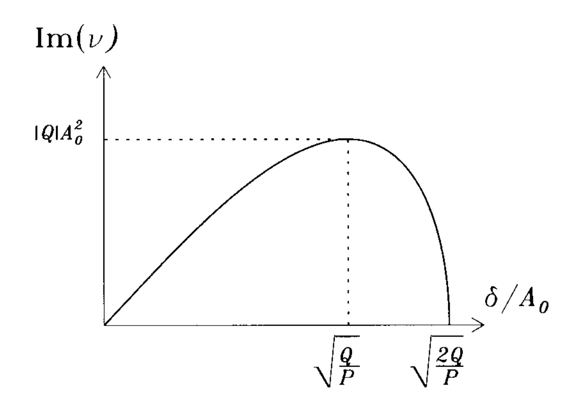


FIG. 3.4 – Taux de croissance $\mathrm{Im}(\nu)$ en fonction du vecteur d'onde δ/A_0.

3.2.3 Relation entre le breather de SG et le soliton de NLS

Nous avons obtenu l'équation de NLS (3.25) à partir d'un développement en échelles multiples de l'équation de SG, puis en cherchant une solution de faible amplitude dont le terme dominant est finalement de la forme

$$\theta = \varepsilon A(\xi_1, \tau_2)\, e^{i(qX_0 - \omega T_0)} + \text{c.c.} \quad . \tag{3.55}$$

Comme nous avions noté également que la solution breather de SG peut avoir une amplitude faible et qu'elle correspond à une solution oscillante localisée spatialement, elle apparaît comme qualitativement semblable au soliton de NLS qui comporte une enveloppe modulant une porteuse oscillante. Il doit donc exister une relation entre ces deux solutions et nous allons en effet vérifier que la limite faible amplitude du breather de SG coïncide avec la solution soliton de l'équation de NLS. C'est la raison pour laquelle on nomme parfois le soliton de NLS solution « breather » de NLS par abus de langage.

Notons avant tout que si l'on souhaite obtenir une solution de type breather avec le soliton de NLS, il faut supprimer l'oscillation spatiale de la porteuse en considérant le cas ou le vecteur d'onde q est nul. Compte tenu de la relation de dispersion $\omega^2 = \omega_0^2 + c_0^2 q^2$ de l'équation de SG, cela impose que l'excitation correspondante se trouve au bas de la bande de phonons et que la vitesse de groupe soit nulle. Les variables ξ et τ du repère mobile à la vitesse v_g se réduisent par conséquent aux variables ordinaires, et l'équation de NLS qui correspond à SG se réduit dans ce cas à

$$i\frac{\partial A}{\partial T_2} + \frac{c_0^2}{2\omega_0}\frac{\partial^2 A}{\partial X_1^2} + \frac{\omega_0}{4}|A|^2 A = 0 \quad . \tag{3.56}$$

Pour comparer avec la solution breather de SG fixe spatialement, il faut chercher la solution de NLS correspondante dont l'enveloppe ne se propage pas

par rapport au réseau, c'est-à-dire dont la vitesse de l'enveloppe u_e est nulle. Cependant, comme l'amplitude de la solution est $\phi_0 = \sqrt{(u_e^2 - 2u_e u_p)/2PQ}$, il faut prendre avec précaution la limite où u_e s'annule si l'on veut une solution d'amplitude non nulle. On peut *imposer* $u_e u_p$ *constant* et négatif pour obtenir un terme positif sous la racine sachant que le produit PQ est positif. L'égalité $u_e u_p = -PQ\phi_0^2 =$ cste, implique que la vitesse de la porteuse u_p diverge à la limite. C'est parfaitement cohérent avec la relation de dispersion (3.46) trouvée pour les ondes planes, puisque la phase du soliton $u_e(X_1 - u_p T_2)/2P$ confirme que, dans cette limite, le vecteur d'onde diverge tout comme la vitesse de phase.

En prenant la limite u_e tendant vers 0, on arrive alors à la solution de l'équation de NLS ayant une vitesse d'enveloppe nulle sous la forme

$$\psi = \phi_0 \operatorname{sech}\left[\sqrt{\frac{Q}{2P}}\ \phi_0 X_1\right] e^{i\frac{Q\phi_0^2}{2}T_2} \quad . \tag{3.57}$$

En reportant dans l'expression de θ qui correspond à la solution de SG, en tenant compte des correspondances $X_1 = \varepsilon x$, $T_2 = \varepsilon^2 t$, $Q = \omega_0/4$ et $P = c_0^2/2\omega_0$, on obtient

$$\theta = \varepsilon\phi_0 \operatorname{sech}\left[\sqrt{\frac{\omega_0^2}{4c_0^2}}\ \phi_0\varepsilon x\right]\left(e^{-i\omega_0 t\left(1 - \frac{\phi_0^2\varepsilon^2}{8}\right)} + \text{c.c.}\right) \quad , \tag{3.58}$$

c'est-à-dire

$$\theta = \theta_0 \operatorname{sech}\left[\frac{\omega_0\theta_0 x}{4c_0}\right] \cos\left[\omega_0\left(1 - \frac{\theta_0^2}{32}\right)t\right] \tag{3.59}$$

en notant $\theta_0 = 2\varepsilon\phi_0$.

On trouve donc une excitation localisée spatialement qui oscille avec une pulsation *inférieure* à la pulsation ω_0, c'est-à-dire dans le gap, comme c'est le cas pour le breather de SG. Toujours, comme dans le cas du breather de SG, on note également que la pulsation décroît lorsque l'amplitude augmente.

Il est possible de rendre la comparaison encore plus quantitative en considérant la limite faible amplitude de la solution breather (2.33) de SG :

$$\theta_B = 4\tan^{-1}\left[\frac{c_0}{u}\operatorname{sech}\frac{\omega_0 x}{c_0\sqrt{1+u^2/c_0^2}}\ \sin\frac{\omega_0 t u}{c_0\sqrt{1+u^2/c_0^2}}\right] \quad , \tag{3.60}$$

dans la région où $c_0/u \ll 1$. En développant jusqu'à l'ordre deux par rapport à la variable c_0/u, on obtient

$$\theta_B \simeq \theta_0 \operatorname{sech}\frac{\omega_0\theta_0 x}{4c_0}\ \sin\left[\omega_0 t\left(1 - \frac{\theta_0^2}{32}\right)\right] \quad , \tag{3.61}$$

en notant $\theta_0 = 4c_0/u$. On obtient exactement la solution de NLS (3.59), à un changement de l'origine des temps près pour transformer le sinus en cosinus.

L'ensemble de l'étude est donc tout à fait cohérent : que l'on prenne la limite des faibles amplitudes sur l'équation elle-même (ce qui conduit à l'équation de NLS puis à sa solution breather), ou sur la solution de l'équation de SG résolue sans approximation, on parvient au même résultat.

3.3 Relations de conservation

3.3.1 Le lagrangien de NLS

L'équation de NLS peut être dérivée d'un lagrangien, à partir duquel on peut aussi obtenir, par transformée de Legendre, un hamiltonien. Pour le montrer, il est utile de simplifier d'abord l'équation de NLS en réalisant un changement de l'échelle d'espace et de l'unité d'amplitude de manière appropriée. On considère le cas où les deux paramètres P et Q sont positifs et on pose

$$X = \frac{x}{\sqrt{2P}} \quad \text{et} \quad \psi = \varphi\sqrt{Q} \quad . \tag{3.62}$$

L'équation de NLS (3.27) se réduit à

$$i\varphi_t + \frac{1}{2}\varphi_{XX} + |\varphi|^2\varphi = 0 \quad . \tag{3.63}$$

Nous allons vérifier que cette équation peut être obtenue à partir d'un principe variationnel appliqué à une action que nous allons expliciter. Il n'existe malheureusement pas de méthode systématique pour obtenir un lagrangien à partir des équations de la dynamique. Par exemple, on a connu, et utilisé abondamment, l'équation de la mécanique des fluides bien avant de connaître le lagrangien dont elle dérivait. Une seconde particularité est qu'il peut exister plusieurs lagrangiens donnant les même équations dynamiques, puisque cette fonction est définie à un gradient près.

Nous noterons la densité lagrangienne $\mathcal{L} = \mathcal{L}(\varphi, \varphi_t, \varphi_X, \varphi^*, \varphi_t^*, \varphi_X^*, X, t)$ qui permet de définir

$$\text{le lagrangien} \qquad L = \int \mathrm{d}X \ \mathcal{L} \tag{3.64}$$

$$\text{et l'action} \qquad S = \int \mathrm{d}t \ L = \int \mathrm{d}t \int \mathrm{d}X \ \mathcal{L} \quad . \tag{3.65}$$

L'équation de NLS est une équation complexe. Elle concerne donc simultanément deux champs, la partie réelle de φ et sa partie imaginaire. Il est plus commode de considérer les champs φ et φ^* en les traitant comme *indépendants*. Cela peut sembler *a priori* étonnant, mais il faut penser que la donnée de φ est en fait la donnée d'un point dans le plan complexe. Si l'on a choisi *a priori* l'axe réel, on peut en déduire les quantités $\mathrm{Re}\,\varphi$ et $\mathrm{Im}\,\varphi$. Mais si, au contraire, on se donne *a priori* φ et φ^*, l'axe réel est déterminé ensuite

comme la bissectrice des vecteurs définis par φ et φ^* dans le plan complexe. Pour simplifier certaines formules, nous noterons de façon générale φ^ℓ ($\ell = 1$ ou 2) les variables φ et φ^*.

En choisissant la densité de lagrangien suivante :

$$\mathcal{L} = i\left(\varphi\varphi_t^* - \varphi_t\varphi^*\right) + |\varphi_X|^2 - |\varphi|^4 \tag{3.66}$$

on retrouve grâce aux équations de Lagrange (cf. annexe B)

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\varphi_t}\right) + \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}X}\left(\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\varphi_X}\right) = \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\varphi} \tag{3.67}$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\varphi_t^*}\right) + \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}X}\left(\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\varphi_X^*}\right) = \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\varphi^*} \quad , \tag{3.68}$$

les expressions suivantes :

$$\frac{\mathrm{d}(-i\varphi^*)}{\mathrm{d}t} + \frac{\mathrm{d}(\varphi_X^*)}{\mathrm{d}X} = i\varphi_t^* - 2\varphi\varphi^{*2} \;\Rightarrow\; -i\varphi_t^* + \frac{1}{2}\varphi_{XX}^* + \varphi\varphi^{*2} = 0 \quad , \tag{3.69}$$

$$\frac{\mathrm{d}(i\varphi)}{\mathrm{d}t} + \frac{\mathrm{d}(\varphi_X)}{\mathrm{d}X} = -i\varphi_t - 2\varphi^*\varphi^2 \;\Rightarrow\; i\varphi_t + \frac{1}{2}\varphi_{XX} + \varphi^*\varphi^2 = 0 \quad , \tag{3.70}$$

c'est-à-dire l'équation (3.63) et son complexe conjugué.

Il est plus commode, mais non obligatoire, de choisir la densité lagrangienne *réelle* ; ainsi l'on aurait pu également choisir

$$\mathcal{L}' = 2i\varphi\varphi_t^* + |\varphi_X|^2 - |\varphi|^4 \qquad \Rightarrow \qquad i\varphi_t + \frac{1}{2}\varphi_{XX} + \varphi^*\varphi^2 = 0 \quad . \tag{3.71}$$

Cette équation est identique à l'équation (3.63), car la différence entre les deux lagrangiens $\mathcal{L}' - \mathcal{L} = 2i\varphi\varphi_t^* - i\left(\varphi\varphi_t^* - \varphi_t\varphi^*\right) = i\partial_t|\varphi|^2$, correspond à un terme qui peut s'écrire sous la forme d'un gradient. En revanche, notons que le lagrangien : $\mathcal{L}'' = i\varphi\varphi_t^* + |\varphi_X|^2 + |\varphi|^4$ conduit à $i\varphi_t + \varphi_{XX} - \varphi^*\varphi^2 = 0$ qui correspond à l'équation de NLS avec un produit $PQ < 0$. Ce n'est donc pas un bon choix pour le cas que nous avons choisi.

3.3.2 L'hamiltonien de NLS

Disposant d'un lagrangien, on peut établir un hamiltonien H, ou bien une densité hamiltonienne $\mathcal{H}$, par la méthode habituelle. Il faut pour cela introduire les densités d'impulsions canoniques, variables conjuguées de φ et φ^* :

$$p_\varphi = \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\varphi_t} = \frac{\partial}{\partial\varphi_t}\left[i(\varphi\varphi_t^* - \varphi_t\varphi^*) + |\varphi_X|^2 - |\varphi|^4\right] = -i\varphi^* \tag{3.72}$$

$$p_{\varphi^*} = \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\varphi_t^*} = i\varphi \quad . \tag{3.73}$$

On peut alors obtenir la densité hamiltonienne directement grâce à la transformation canonique suivante :

$$\mathcal{H} = \sum_{\ell} p_{\varphi^\ell} \frac{\mathrm{d}\varphi^\ell}{\mathrm{d}t} - \mathcal{L} \tag{3.74}$$

$$= p_\varphi \varphi_t + p_{\varphi^*} \varphi_t^* - \mathcal{L} = -i\varphi^* \varphi_t + i\varphi\varphi_t^* - \mathcal{L}$$

$$= |\varphi|^4 - |\varphi_X|^2 \quad . \tag{3.75}$$

Si l'on essaie de déduire les équations du mouvement à partir de l'hamiltonien (3.75), on rencontre des difficultés si l'on ne procède pas de manière prudente. Les préfacteurs ne sont pas corrects, notamment certains facteurs 2. C'est une difficulté classique pour les hamiltoniens qui dépendent des dérivées premières du champ.

En effet, contrairement à l'hypothèse essentielle que l'on utilise lors de la dérivation des équations standards d'Hamilton (cf. annexe B), les variables φ et φ^* sont *ici directement liées* à leurs variables conjuguées p_φ et p_{φ^*} (cf. équations (3.72) et (3.73)) et non à travers des opérateurs dérivées comme dans les cas usuels. L'espace des phases n'est donc plus défini de manière satisfaisante et il faut donc tenir compte de cette contrainte supplémentaire. Cela nécessite de redéfinir les crochets de Poisson. Nous n'entrerons pas dans les détails de la classification des deux types de contraintes (première ou deuxième classe) introduite par Dirac puisqu'il est facile d'obtenir, dans ce cas particulier, les équations d'Hamilton correspondantes sans introduire la méthode mise au point par Dirac [46, 143].

Essayons d'obtenir les équations d'Hamilton dans le cas présent où les variables ne sont pas indépendantes. La définition de la densité hamiltonienne (3.74) donne directement l'équation :

$$\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_\varphi} = \frac{\partial}{\partial p_\varphi}\left[\sum_{\ell} p_{\varphi^\ell}\varphi_t^\ell - \mathcal{L}\right] \tag{3.76}$$

$$= \varphi_t + \sum_{\ell} p_{\varphi^\ell}\frac{\partial \varphi_t^\ell}{\partial p_\varphi} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial p_\varphi} \tag{3.77}$$

$$= \varphi_t + \sum_{\ell} p_{\varphi^\ell}\frac{\partial \varphi_t^\ell}{\partial p_\varphi} - \sum_{\ell} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \varphi_t^\ell}\frac{\partial \varphi_t^\ell}{\partial p_\varphi} \tag{3.78}$$

$$= \varphi_t + \sum_{\ell} p_{\varphi^\ell}\frac{\partial \varphi_t^\ell}{\partial p_\varphi} - \sum_{\ell} p_{\varphi^\ell}\frac{\partial \varphi_t^\ell}{\partial p_\varphi} \tag{3.79}$$

$$\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_\varphi} = \varphi_t \quad . \tag{3.80}$$

Cette équation d'Hamilton n'est donc pas modifiée par les contraintes relevées ci-dessus.

La seconde équation est plus complexe à obtenir

$$\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \varphi} = \frac{\partial}{\partial \varphi}\left[\sum_{\ell} p_{\varphi^{\ell}} \varphi_t^{\ell} - \mathcal{L}\right] \tag{3.81}$$

$$= \sum_{\ell} \frac{\partial p_{\varphi^{\ell}}}{\partial \varphi} \varphi_t^{\ell} + 0 - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \varphi} \tag{3.82}$$

$$\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \varphi} = \sum_{\ell} \frac{\partial p_{\varphi^{\ell}}}{\partial \varphi} \varphi_t^{\ell} - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \varphi_t}\right) - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}X}\left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \varphi_X}\right) \quad , \tag{3.83}$$

en utilisant l'équation de Lagrange (3.67).

On a aussi

$$\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \varphi_X} = \sum_{\ell} \frac{\partial p_{\varphi^{\ell}}}{\partial \varphi_X} \varphi_t^{\ell} + \sum_{\ell} p_{\varphi^{\ell}} \frac{\partial \varphi_t^{\ell}}{\partial \varphi_X} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \varphi_X} = -\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \varphi_X} \quad . \tag{3.84}$$

En regroupant les équations (3.83) et (3.84), on obtient la seconde équation d'Hamilton

$$\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \varphi} = \sum_{\ell} \frac{\partial p_{\varphi^{\ell}}}{\partial \varphi} \varphi_t^{\ell} - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \varphi_t}\right) + \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}X}\left(\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \varphi_X}\right) \tag{3.85}$$

c'est-à-dire

$$\frac{\mathrm{d}p_{\varphi}}{\mathrm{d}t} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}X}\left(\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \varphi_X}\right) - \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \varphi} + \sum_{\ell} \frac{\partial p_{\varphi^{\ell}}}{\partial \varphi} \varphi_t^{\ell} \quad . \tag{3.86}$$

Étant données les contraintes précisées par les équations (3.72) et (3.73), le dernier terme ne s'annule pas et permet de corriger l'équation par rapport à ce que l'on aurait obtenu en appliquant hâtivement les formules usuelles. On a ainsi

$$2\varphi\varphi^{*2} = i\varphi_t^* - \frac{\mathrm{d}(-i\varphi^*)}{\mathrm{d}t} + \frac{\mathrm{d}\,(-\varphi_X^*)}{\mathrm{d}X} \tag{3.87}$$

$$2\varphi\varphi^{*2} = i\varphi_t^* + i\varphi_t^* - \varphi_{XX}^* \tag{3.88}$$

qui conduit bien à l'équation (3.69).

Il est étonnant mais instructif de constater que cette difficulté peut rester cachée si l'on considère le lagrangien imaginaire (3.71). En effet, les variables canoniques sont alors $p_{\varphi} = \partial\mathcal{L}/\partial\varphi_t = 0$ et $p_{\varphi^*} = \partial\mathcal{L}/\partial\varphi_t^* = 2i\varphi$. L'hamiltonien (3.75) n'est en revanche pas modifié et l'application de l'équation d'Hamilton standard conduit ainsi à :

$$\frac{\mathrm{d}p_{\varphi^*}}{\mathrm{d}t} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}X}\left(\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \varphi_X^*}\right) - \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \varphi^*} \qquad \Rightarrow \qquad 2i\varphi_t = -\varphi_{XX} - 2\varphi\varphi^{*2} \tag{3.89}$$

qui correspond bien à l'équation de NLS que l'on cherche. En revanche, l'équation pour p_φ, conduit à

$$\frac{\mathrm{d}p_\varphi}{\mathrm{d}t} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}X}\left(\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \varphi_X}\right) - \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \varphi} \qquad \Rightarrow \qquad 0 = -\varphi^*_{XX} - 2\varphi^*\varphi^2 \quad . \tag{3.90}$$

Le fait que ces deux équations ne soient pas complexes conjuguées l'une de l'autre est le révélateur du problème que nous avons soulevé.

3.4 Théorème de Nœther

L'équation NLS appartient à la classe des systèmes totalement intégrables pour lesquels on peut construire une infinité de relations de conservation à partir de la méthode de diffusion inverse. Certaines relations de conservation, importantes pour les applications physiques, peuvent cependant être obtenues plus simplement à partir des propriétés d'invariance (symétries) de l'équation, en utilisant le théorème de Nœther pour un système lagrangien.

3.4.1 Rappel du théorème

On considère un système qui dépend de deux champs φ et φ^*, et de deux coordonnées X et t. On envisage une transformation infinitésimale des champs et des coordonnées sous la forme

$$\begin{aligned}
X &\rightsquigarrow X' = X + \varepsilon\chi \\
t &\rightsquigarrow t' = t + \varepsilon\tau \\
\varphi &\rightsquigarrow \varphi' = \varphi + \varepsilon\psi \\
\varphi^* &\rightsquigarrow \varphi^{*\prime} = \varphi^* + \varepsilon\psi^* \quad .
\end{aligned}$$

Si cette transformation laisse invariante l'expression fonctionnelle de la densité lagrangienne ainsi que l'action, on a la relation de conservation [64]

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left\{\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \varphi_t}\left[\psi - \chi\varphi_X - \tau\varphi_t\right] + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \varphi^*_t}\left[\psi^* - \chi\varphi^*_X - \tau\varphi^*_t\right] + \mathcal{L}\tau\right\}$$
$$+ \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}X}\left\{\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \varphi_X}\left[\psi - \chi\varphi_X - \tau\varphi_t\right] + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \varphi^*_X}\left[\psi^* - \chi\varphi^*_X - \tau\varphi^*_t\right] + \mathcal{L}\chi\right\} = 0 \ . \tag{3.91}$$

Intégrons spatialement cette relation. Si l'on choisit des conditions aux limites telles que $|\varphi| \to 0$, $|\varphi_X| \to 0$, $|\varphi_t| \to 0$ à l'infini, ou bien des conditions aux limites périodiques, la contribution du second terme (en $\mathrm{d}/\mathrm{d}X$) s'annule et

on obtient une relation de conservation sous forme intégrale

$$\int \mathrm{d}X \left\{ \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \varphi_t} \left[\psi - \chi\varphi_X - \tau\varphi_t\right] + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \varphi_t^*} \left[\psi^* - \chi\varphi_X^* - \tau\varphi_t^*\right] + \mathcal{L}\tau \right\} = C \quad , \tag{3.92}$$

où C est une constante.

3.4.2 Application à l'équation NLS

Considérons quelques transformations intéressantes et tout d'abord une **variation infinitésimale de la phase des champs** qui laisserait les coordonnées inchangées ($\chi = 0$, $\tau = 0$) tout en multipliant les champs par un facteur de phase $e^{i\varepsilon}$ avec $\varepsilon \ll 1$:

$$\varphi \rightsquigarrow \varphi' = \varphi e^{i\varepsilon} \quad \text{soit} \quad \varphi' = \varphi(1 + i\varepsilon) + \mathcal{O}(\varepsilon^2) \quad i.e. \quad \psi = i\varphi \tag{3.93}$$

$$\varphi^* \rightsquigarrow \varphi^{*\prime} = \varphi^* e^{-i\varepsilon} \ \text{soit} \ \varphi^{*\prime} = \varphi^*(1 - i\varepsilon) + \mathcal{O}(\varepsilon^2) \quad i.e. \quad \psi^* = -i\varphi^* . \tag{3.94}$$

La densité lagrangienne et l'action sont inchangées par cette transformation. La relation de conservation (3.92) donne

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}X \left\{ (-i\varphi^*)(i\varphi) + (+i\varphi)(-i\varphi^*) \right\} = C \quad , \tag{3.95}$$

qui correspond à la relation de conservation de la norme, habituelle pour l'équation de Schrödinger en mécanique quantique.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}X |\varphi|^2 = C' \quad . \tag{3.96}$$

Considérons maintenant une **translation temporelle infinitésimale** qui laisse X et les champs φ et φ^* inchangés mais change t en $t' = t + \varepsilon$. Elle correspond à $\tau = 1$, $\chi = 0$ et $\psi = \psi* = 0$. Comme $\partial/\partial t = \partial/\partial t'$, la densité lagrangienne et l'action sont inchangées dans cette transformation. La relation de conservation donne

$$\int \mathrm{d}X \left\{ \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \varphi_t} \left[-\varphi_t\right] + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \varphi_t^*} \left[-\varphi_t^*\right] + \mathcal{L} \right\} = C'' \quad . \tag{3.97}$$

En développant, on obtient

$$\int \mathrm{d}X \left\{ |\varphi_X|^2 - \frac{1}{2}|\varphi|^4 \right\} = C'' \quad , \tag{3.98}$$

qui est, au signe près, la relation de conservation de l'énergie puisque le terme de gauche correspond à l'intégrale de la densité hamiltonienne (3.75).

On retrouve le résultat général qui lie conservation de l'énergie et invariance par translation temporelle.

Il est à noter que la densité hamiltonienne est non bornée par valeur inférieure. On pourrait penser que cela peut poser un problème lorsque l'on étudie la physique statistique d'un système décrit par l'équation NLS, mais ce n'est pas le cas puisque la conservation de la norme, équation (3.96), impose une condition supplémentaire qui borne l'énergie.

3.5 Lignes électriques non-linéaires

Comme nous l'avions évoqué dès l'introduction de ce chapitre, l'équation de NLS est très générale et peut être obtenue pour de très nombreux systèmes faiblement non-linéaires dans lesquels peuvent se propager des ondes faiblement dispersives : la liste des applications est donc très longue. Nous en présentons ici quelques-unes, sélectionnées, soit en raison de la facilité avec laquelle elles se prêtent à des expériences (lignes électriques), soit pour leur importance pratique et technologique (fibres optiques), ou pour illustrer la généralité de l'équation de NLS à plus d'une dimension d'espace (autofocalisation en optique).

L'exemple des lignes électriques non-linéaires est intéressant car, d'une part, il est facile à réaliser expérimentalement et, d'autre part, il montre que l'on peut avoir coexistence de deux types de solitons dans le même système physique : des solitons « impulsions » et des solitons « enveloppes ».

Repartons de la ligne électrique déjà étudiée au chapitre 1, décrite dans l'approximation des milieux continus par l'équation (équation (1.39))

$$v_{tt} - c_0^2 v_{xx} - \frac{c_0^2}{12} v_{xxxx} - a(v^2)_{tt} = 0 \quad . \tag{3.99}$$

Dans la limite des amplitudes faibles où la différence de potentiel v est d'ordre ε mais néanmoins suffisante pour exciter les non-linéarités, cette équation se réduit à l'équation de NLS quand on cherche une solution par la méthode des échelles multiples

$$v = \varepsilon V_1(X_0, T_0, X_1, T_1, X_2, T_2, ...) + \varepsilon^2 V_2(T_0, T_1, T_2, X_0, X_1, X_2, ...) + ... \quad . \tag{3.100}$$

Le calcul est plus fastidieux que dans le cas de sine-Gordon à cause du terme de puissance paire dans l'équation. Il se conduit cependant de la même façon et l'on trouve

$$V_1 = A_1(X_1, T_1, X_2, T_2, ...)\, e^{i(qX_0 - \omega T_0)} + \text{c.c.} \tag{3.101}$$

où q et ω sont liés par la relation de dispersion linéaire $\omega^2 = c_0^2 q^2 - c_0^2 q^4/12$, dont la vitesse de groupe est $v_g = c_0^2(q - q^3/6)/\omega$.

Le calcul montre que pour satisfaire l'équation à l'ordre ε^2, on *doit* introduire le terme

$$V_2 = A_2 e^{2i(qX_0 - \omega T_0)} + \text{c.c.} \quad \text{avec} \quad A_2 = \frac{4a\omega^2}{c_0^2 q^4} A_1^2 \quad . \tag{3.102}$$

En passant, comme dans le cas de SG, dans le repère mobile à la vitesse de groupe en introduisant les variables $\xi_i = X_i - v_g T_i$ et $\tau_i = T_i$, on obtient finalement l'équation pour A_1

$$i\frac{\partial A_1}{\partial \tau_2} + \frac{1}{2\omega}\left[c_0^2\left(1 - \frac{q^2}{2}\right) - v_g^2\right]\frac{\partial^2 A_1}{\partial \xi_1^2} - \frac{4a^2\omega^3}{c_o^2 q^4}|A_1|^2 A_1 = 0 \quad . \tag{3.103}$$

En remplaçant la vitesse de groupe par sa valeur, on arrive alors à une équation de NLS dont les coefficients sont

$$P = -\frac{c_0^2 q^2}{72 - 6q^2}(18 - q^2) \quad \text{et} \quad Q = -\frac{4a^2\omega^3}{c_0^2 q^4} \quad . \tag{3.104}$$

Comme Q est toujours négatif ainsi que P pour les porteuses de grande longueur d'onde (hypothèse de départ pour appliquer l'approximation des milieux continus), la condition $PQ > 0$ pour avoir des solitons est par conséquent vérifiée, en accord avec les observations expérimentales [9].

On pourrait s'étonner de constater qu'*un système* physique peut être décrit par *deux équations* aussi différentes que l'équation de Boussinesq modifiée qui a des solutions solitons-impulsion et l'équation de NLS qui a des solutions solitons-enveloppe. Et pourtant l'expérience confirme la validité de ces deux approximations (qui s'appliquent pour des excitations initiales de la chaîne électrique qui sont différentes) et montre même que les deux types de solitons peuvent être créés simultanément sur la chaîne. Nous reviendrons sur ce point dans la discussion du chapitre 4, consacré à la modélisation.

3.6 Solitons dans les fibres optiques

C'est certainement l'une des applications fondamentales des solitons et un cas exemplaire où l'idée d'un « théoricien du non-linéaire » débouche sur un marché de millions d'euros ! La prochaine liaison Atlantique par fibre optique devrait être conçue sur une technologie issue des notions que nous présentons dans cette section.

3.6.1 Origine de la non-linéarité : polarisation non-linéaire

Lorsque l'on étudie la propagation d'une onde électromagnétique dans un diélectrique, on doit tenir compte de la polarisation du diélectrique $\vec{P}(\vec{r}, t)$

sous l'effet du champ $\overrightarrow{E}(\overrightarrow{r}, t)$. En général, on se limite à la contribution linéaire, c'est-à-dire au premier terme dans le développement de $\overrightarrow{P}$ en fonction de $\overrightarrow{E}$

$$P_j(t) = \epsilon_0 \int_{-\infty}^{+\infty} \chi_{jk}^{(1)}(t-\tau)E_k(\tau)\mathrm{d}\tau = \epsilon_0\ \chi_{jk}^{(1)}(t) \star E_k(t) \tag{3.105}$$

où P_j et E_k sont les composantes de $\overrightarrow{P}$ et de $\overrightarrow{E}$ et où la sommation tient compte des éventuels effets de retard dans la polarisation sous l'effet du champ. Le signe $\star$ désigne le produit de convolution et l'on omet les sommations sur les indices répétés.

En notant $\widetilde{F}(\omega) = \int F(t)e^{i\omega t}\mathrm{d}t$, la transformée de Fourier de la fonction $F(t)$, on peut réécrire cette équation dans l'espace de Fourier, de la façon suivante :

$$\widetilde{P}_j(\omega) = \epsilon_0\ \widetilde{\chi}_{jk}^{(1)}(\omega)\widetilde{E}_k(\omega) \tag{3.106}$$

où la sommation implicite sur l'indice répété k est omise ; $\widetilde{\chi}_{jk}^{(1)}(\omega)$ est le tenseur de susceptibilité diélectrique du matériau.

Lorsque l'on étudie la propagation d'un signal électromagnétique dans une fibre optique [14], les effets non-linéaires peuvent devenir importants pour deux raisons :

- Étant donné la très faible section d'une fibre (10^{-6} cm^2), une puissance incidente de quelques watts se traduit dans la fibre par des densités de puissance de l'ordre du mégawatt/cm^2.
- Comme dans les applications, on considère la propagation sur de très longues distances, du kilomètre à plusieurs milliers de kilomètres, des termes non-linéaires même très faibles peuvent avoir des conséquences considérables par effet cumulatif.

Dans ce cas, il faut tenir compte des termes suivants du développement de la polarisation, qui donnent

$$\begin{aligned} P_j(t) &= \epsilon_0 \int_{-\infty}^{+\infty} \chi_{jk}^{(1)}(t-\tau)E_k(\tau)\mathrm{d}\tau \\ &+ \epsilon_0 \int_{-\infty}^{+\infty} \chi_{jkl}^{(2)}(t-\tau_1, t-\tau_2)E_k(\tau_1)E_l(\tau_2)\mathrm{d}\tau_1\mathrm{d}\tau_2 \\ &+ \epsilon_0 \int_{-\infty}^{+\infty} \chi_{jklm}^{(3)}(t-\tau_1, t-\tau_2, t-\tau_3)E_k(\tau_1)E_l(\tau_2)E_m(\tau_3)\mathrm{d}\tau_1\mathrm{d}\tau_2\mathrm{d}\tau_3 \end{aligned} \tag{3.107}$$

ce qui suggère d'introduire les tenseurs de susceptibilités diélectriques d'ordre deux $\chi_{jkl}^{(2)}(\omega_1, \omega_2)$, et trois $\chi_{jklm}^{(3)}(\omega_1, \omega_2, \omega_3)$.

Considérons par exemple la transformée de Fourier, notée $\widetilde{T}_2$, du deuxième terme. En exprimant $\chi^{(2)}(t-\tau_1, t-\tau_2)$ en fonction de sa transformée de

Fourier, on obtient

$$\widetilde{T}_2(\omega) = \int dt \int d\tau_1 \int d\tau_2 \frac{1}{4\pi^2} \int d\omega_1 \int d\omega_2 \, \widetilde{\chi}^{(2)}(\omega_1, \omega_2) \, e^{-i\omega_1(t-\tau_1) - i\omega_2(t-\tau_2)} \, E_1(\tau_1) E_2(\tau_2) e^{i\omega t} \quad (3.108)$$

$$= \frac{1}{4\pi^2} \int d\omega_1 \int d\omega_2 \, \widetilde{\chi}^{(2)}(\omega_1, \omega_2) \int d\tau_1 E_1(\tau_1) e^{i\omega_1 \tau_1} \int d\tau_2 E_2(\tau_2) e^{i\omega_2 \tau_2} \underbrace{\int dt \; e^{i(\omega - \omega_1 - \omega_2)t}}_{\delta(\omega - \omega_1 - \omega_2)} \quad (3.109)$$

$$= \frac{1}{4\pi^2} \int d\omega_1 \int d\omega_2 \, \widetilde{\chi}^{(2)}(\omega_1, \omega_2) \, \widetilde{E}_1(\omega_1) \widetilde{E}_2(\omega_2) \, \delta(\omega - \omega_1 - \omega_2) \; , \quad (3.110)$$

en utilisant le fait que $\delta(\omega)$ est la transformée de Fourier de l'unité. De même

$$\widetilde{T}_3(\omega) = \frac{1}{8\pi^3} \int d\omega_1 \int d\omega_2 \int d\omega_3 \, \widetilde{\chi}^{(3)}(\omega_1, \omega_2, \omega_3) \, \widetilde{E}_1(\omega_1) \widetilde{E}_2(\omega_2) \widetilde{E}_3(\omega_3) \, \delta(\omega - \omega_1 - \omega_2 - \omega_3) \quad . \quad (3.111)$$

Ces tenseurs doivent avoir la symétrie du matériau qui, pour une fibre optique est *isotrope*, ce qui leur impose des contraintes. Une rotation du champ électrique doit entraîner une rotation correspondante de la polarisation. On en déduit que les tenseurs sont diagonaux avec tous leurs éléments égaux : ce sont donc des *scalaires*. En outre, comme le changement de signe du champ électrique doit changer le signe de la polarisation, le tenseur $\chi^{(2)}$ doit être nul et le premier terme non-linéaire du développement (3.107) est celui d'ordre trois $\chi^{(3)}$. C'est la raison pour laquelle les expériences de génération de seconde harmonique qui reposent sur la présence du terme $\widetilde{T}_2$ sont réalisées avec des cristaux non isotropes. Cette technologie, appelée « l'effet $\chi^{(2)}$ », que nous ne traiterons pas ici, ouvre un domaine de recherche en pleine effervescence actuellement.

Dans un matériau isotrope, si l'on applique un champ $\overrightarrow{E}$ de pulsation ω, comportant donc des termes en $\exp(-i\omega t)$ et $\exp(i\omega t)$, la fonction de Dirac de l'équation (3.111) implique la présence de deux contributions au terme d'ordre trois

$$\widetilde{T}_3(\omega) = \widetilde{\chi}^{(3)}(-\omega, -\omega, -\omega) E_0^3 e^{-3i\omega t} + \widetilde{\chi}^{(3)}(\omega, -\omega, -\omega) |E_0|^2 E_0 e^{-i\omega t} + c.c. \quad , \quad (3.112)$$

c'est-à-dire qu'en chaque point l'on aura une contribution de l'harmonique trois ainsi qu'une contribution non-linéaire à la pulsation du fondamental.

En général, la croissance de la contribution de l'harmonique trois est faible en raison de l'absence de ce que l'on appelle l'accord de phase (« phase matching ») : les harmoniques trois générées en deux points différents ne sont pas en phase et, en moyenne, tendent à se compenser par superposition donnant des interférences, soit destructives, soit constructives. De plus, la relation de dispersion du milieu $\omega(k)$ n'est en général pas satisfaite par le couple $\{3\omega, 3k\}$. En revanche, les effets non-linéaires sur le fondamental ont eux un effet cumulatif. C'est pourquoi, dans les fibres optiques, le second terme de l'expression (3.112) sera le terme dominant.

Ainsi, si une fibre optique est excitée à l'une de ses extrémités par un champ électrique $\vec{E} = \vec{E_0}(r)e^{i\left(\vec{k}.\vec{r}-\omega t\right)}$, les termes dominants de la polarisation seront

$$\vec{\tilde{P}}(\omega, \vec{r}) = \epsilon_0\tilde{\chi}^{(1)}(\omega)\vec{E_0}(r)e^{i\left(\vec{k}.\vec{r}-\omega t\right)} + \epsilon_0\tilde{\chi}^{(3)}(\omega)\vec{E_0}|\vec{E_0}|^2e^{i\left(\vec{k}.\vec{r}-\omega t\right)} \tag{3.113}$$

où les facteurs 2π provenant des transformées de Fourier ont été absorbés dans la définition des susceptibilités diélectriques pour simplifier les notations. On peut interpréter cette forme de la polarisation en disant que l'indice optique du milieu comporte une contribution en $|\vec{E_0}|^2$: il s'agit de l'effet Kerr optique.

3.6.2 La structure du champ électrique dans la fibre

L'expression de $\vec{P}(\omega)$ permet déjà d'entrevoir l'équation de NLS pour décrire la propagation dans une fibre mais le calcul complet est assez fastidieux car l'onde électromagnétique est une onde *vectorielle* alors que jusqu'ici nous avons étudié des champs scalaires. Cependant, si l'on considère une fibre optique monomode et des ondes électromagnétiques polarisées, on peut se ramener à un champ scalaire ; la structure de l'onde dans la fibre, c'est-à-dire l'expression du champ au niveau d'une section, est en effet déterminée par les conditions aux limites transversales de sorte que seule l'amplitude du champ dans un mode donné de propagation reste à déterminer en fonction de z, la variable correspondant à la propagation dans la direction de l'axe de la fibre. En outre, la structure de l'onde peut être obtenue avec une excellente approximation en considérant uniquement *la partie linéaire de la polarisation* car elle met en jeu la propagation dans la direction transversale, donc sur des longueurs très faibles sur lesquelles les effets non-linéaires ne jouent pas un rôle significatif.

L'étude de la propagation de l'onde électromagnétique dans une fibre peut donc être séparée en deux étapes :

- détermination de la structure transversale de l'onde par résolution des équations *linéarisées* ;
- étude de la propagation le long de la fibre en tenant compte des effets *non-linéaires*.

Le calcul, assez long et technique, est présenté dans les références [115] et [84]. Ici, comme le détail de la structure transversale n'est pas très important, nous allons donner uniquement les idées de base pour la première étape et examiner plus complètement la seconde.

Pour trouver la structure de l'onde dans la fibre, on part de l'équation de propagation

$$\nabla^2 \vec{E} - \vec{\nabla}\left(\vec{\nabla}.\vec{E}\right) - \frac{1}{\epsilon_0 c^2}\frac{\partial^2 \vec{D}}{\partial t^2} = \vec{0} \quad , \tag{3.114}$$

déduites des deux équations de Maxwell

$$\vec{\nabla} \wedge \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \qquad \text{et} \qquad \vec{\nabla} \wedge \vec{H} = \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} \quad . \tag{3.115}$$

Nous nous intéressons au cas d'un milieu non conducteur ($\vec{j} = \vec{0}$) et non magnétique ($\vec{B} = \mu_0 \vec{H}$). L'expression de $\vec{D} = \epsilon_0 \vec{E} + \vec{P}$, écrite en ne considérant que la polarisation linéaire, conduit à

$$\vec{D} = \epsilon_0 \vec{E} + \epsilon_0 \chi(\omega) \vec{E} = \epsilon(\omega) \vec{E}(\vec{r}, t) \quad . \tag{3.116}$$

La permittivité diélectrique ϵ peut dépendre de la distance à l'axe de la fibre mais les variations sont négligeables à l'échelle de la longueur d'onde du rayonnement utilisé, en particulier pour les fibres à gradient d'indice dans lesquelles la variation de l'indice se fait sur une distance de l'ordre du rayon de la fibre, grand devant la longueur d'onde. La relation $\vec{\nabla}.\vec{D} = 0$ donne

$$\epsilon \vec{\nabla}.\vec{E} + \vec{E}.\vec{\nabla}\epsilon = \left(\epsilon \vec{k} + \vec{\nabla}\epsilon\right).\vec{E} = 0 \quad , \tag{3.117}$$

et l'hypothèse $|\vec{\nabla}\epsilon| \ll \epsilon/\lambda$ permet de négliger le second terme par rapport au premier puisque $k = 2\pi/\lambda$, ce qui conduit à $\vec{\nabla}.\vec{E} = 0$. Cette approximation simplifie les calculs, mais elle n'est pas indispensable pour la validité des raisonnements sur la propagation non-linéaire dans une fibre.

En prenant la transformation de Fourier temporelle de l'équation (3.114), on obtient alors

$$\nabla^2 \vec{E}(r, \omega) + \frac{\omega^2}{\epsilon_0 c^2}\, \epsilon(\vec{r}, \omega) \vec{E}(\vec{r}, \omega) = \vec{0} \quad , \tag{3.118}$$

dont on peut chercher des solutions sous la forme d'*onde guidée*

$$\vec{E}(\vec{r}, \omega) = \vec{U}(\vec{r_\perp}, \omega)\, e^{i(kz - \omega t)} \quad , \tag{3.119}$$

en notant $\vec{r_\perp}$ le vecteur position dans un plan de section transversale la fibre ($\vec{r} = \vec{r_\perp} + z\vec{e_z}$), z étant la direction le long de l'axe de la fibre. Ces ondes sont bien des ondes guidées par la fibre si $|\vec{U}(\vec{r_\perp}, \omega)|$ décroît exponentiellement quand on s'éloigne de l'axe de la fibre. Cette condition à la limite dans un plan

de section de la fibre impose une relation de dispersion pour chaque mode $\overrightarrow{U_n}$ de propagation possible. Elle peut s'écrire

$$k_n = \frac{\omega \beta_n(\omega)}{c} \quad . \tag{3.120}$$

Pour chacun de ces modes, l'orientation de $\overrightarrow{E}$ et sa distribution transversale sont bien déterminées, mais son amplitude ne l'est pas puisque le mode est solution de l'équation *linéaire* (3.118). C'est pourquoi, lorsque l'on s'intéresse à un mode particulier, il suffit d'étudier un *scalaire*, l'amplitude du mode.

Choisissons $\overrightarrow{U}$, de telle sorte que l'on ait $\overrightarrow{U}(\overrightarrow{r_\perp} = 0, \omega) = 1$ pour fixer l'échelle d'amplitude et notons $\widetilde{\phi}(z, \omega)$ le coefficient multiplicatif qui donne l'amplitude dans une section, afin de pouvoir écrire

$$\overrightarrow{E}(\overrightarrow{r}, \omega) = \widetilde{\phi}(z, \omega)\, \overrightarrow{U}(\overrightarrow{r}, \omega)\, e^{i(kz - \omega t)} \quad . \tag{3.121}$$

L'amplitude de ces modes est indépendante du temps. On ne peut pas utiliser simplement l'un des modes pour transmettre de l'information le long de la fibre. On doit nécessairement moduler l'amplitude du signal et c'est pourquoi l'on transmet dans les fibres à solitons des impulsions lumineuses sous la forme de *paquets d'ondes* qui sont des superpositions de plusieurs modes, centrées autour d'une pulsation ω_0 correspondant au vecteur d'onde k_0 (fig. 3.5). Une telle superposition s'écrit

$$\overrightarrow{E}\,(\overrightarrow{r_\perp}, z, t) = \int_{\Delta\Omega} \mathrm{d}\Omega\, \widetilde{\phi}(z, \Omega)\, \overrightarrow{U}(\overrightarrow{r_\perp}, \omega_0 + \Omega)\, e^{i[(k_0 + Q(\Omega))z - (\omega_0 + \Omega))t]} \quad . \tag{3.122}$$

On somme ainsi différentes composantes de pulsation $\omega = \omega_0 + \Omega$, correspondant chacune à un coefficient d'amplitude $\widetilde{\phi}(\Omega)$ et un vecteur d'onde $k(\omega_0 + \Omega) = k_0 + Q(\Omega)$. On choisit la modulation pour que la variation de la fréquence autour de la porteuse soit faible, c'est-à-dire $\Delta\Omega \ll \omega_0$.

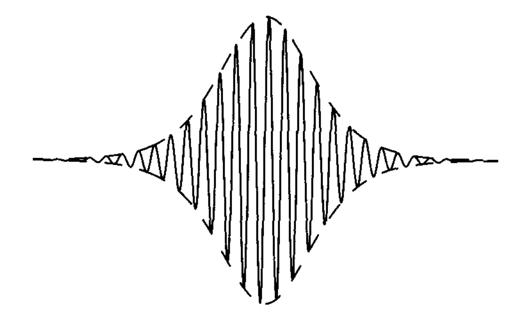


FIG. 3.5 – Représentation d'une impulsion lumineuse typique de la forme d'un paquet d'ondes où l'enveloppe $\phi(z, t)$ est représentée avec la ligne pointillée alors que la ligne continue représente $\widetilde{\phi} U e^{i(k_0 z - \omega_0 t)}$.

Dans ce cas, on peut supposer que la structure spatiale de chaque composante du paquet d'ondes est identique à celle du mode (ω_0, k_0), ce qui revient à admettre que $\overrightarrow{U}(\overrightarrow{r_\perp}, \omega_0 + \Omega) \simeq \overrightarrow{U}(\overrightarrow{r_\perp}, \omega_0)$. On a donc

$$\overrightarrow{E}(\overrightarrow{r_\perp}, z, t) = \overrightarrow{U}(\overrightarrow{r_\perp}, \omega_0)\, e^{i(k_0 z - \omega_0 t)} \int_{\Delta\Omega} \mathrm{d}\Omega\, \widetilde{\phi}(z, \Omega)\, e^{i[Q(\Omega)z - \Omega t]} \quad . \tag{3.123}$$

L'intégrale donne le facteur d'amplitude $\phi(z,t)$ du paquet d'ondes. Elle apparaît comme la transformée de Fourier de son enveloppe, $\widetilde{\phi}(z, \Omega)$. Or, celle-ci ne comporte que des fréquences basses ($\Delta\Omega \ll \omega_0$). On obtient par conséquent une fonction dont les *variations spatiale et temporelle sont lentes par rapport à la porteuse*, placée devant le signe intégrale. Pour formaliser les choses, on peut alors considérer que ϕ dépend de variables lentes $\phi(\varepsilon z, \varepsilon t)$ (avec $\varepsilon \ll 1$), ou de manière équivalente que ses dérivées spatiales ou temporelles sont d'ordre ε.

Ces approximations sont très bien vérifiées pour un paquet d'ondes transmis dans une fibre optique. En considérant un taux de transfert d'information d'un Giga-bit par seconde, c'est-à-dire 10^9 bits/s, on devra utiliser des impulsions dont la largeur temporelle est de l'ordre de quelques 10^{-10} s, par exemple $\delta t = 2.10^{-10}$ s qui laisse encore suffisamment de temps entre les impulsions pour les séparer. On obtient ainsi une extension spatiale de l'impulsion $c\,\delta t = 3.10^8 \times 2.10^{-10} = 60\,\mathrm{mm}$. Sur cette distance, il y a environ 40 000 longueurs d'ondes de la porteuse si l'on considère un rayonnement dans l'infrarouge proche de $\lambda = 1,5\ \mu$m, longueur d'onde la plus utilisée dans les télécommunications. La variation spatio-temporelle de $\phi(z,t)$ serait dans ce cas 40 000 fois plus lente que celle de la porteuse.

3.6.3 La propagation non-linéaire le long de la fibre

On connaît maintenant la distribution de champ dans un plan normal à la fibre et l'on veut étudier son évolution le long de l'axe z de la fibre. On se place donc sur l'axe $\overrightarrow{r_\perp} = \overrightarrow{0}$ et l'on considère à nouveau l'équation de propagation en tenant compte maintenant des non-linéarités. Dans l'expression de $\overrightarrow{D}$, il est commode, comme nous allons le voir, de séparer la partie linéaire et la partie non-linéaire de la polarisation.

$$\overrightarrow{D} = \epsilon_0 \overrightarrow{E} + \overrightarrow{P} = \epsilon_0 \overrightarrow{E} + \epsilon_0 \chi^{(1)} \overrightarrow{E} + \epsilon_0 \chi^{(3)} |\overrightarrow{E}|^2 \overrightarrow{E} \quad , \tag{3.124}$$

que l'on note

$$\overrightarrow{D} = \overrightarrow{D_\ell} + \epsilon_0 \chi^{(3)} |\overrightarrow{E}|^2 \overrightarrow{E} \qquad \text{avec} \qquad \overrightarrow{D_\ell}(\overrightarrow{r}, \omega) = \epsilon(\overrightarrow{r}, \omega) \overrightarrow{E}(\overrightarrow{r}, \omega) \quad . \tag{3.125}$$

L'équation de propagation s'écrit

$$\nabla^2 \overrightarrow{E} - \frac{1}{\epsilon_0 c^2} \frac{\partial^2 \overrightarrow{D_\ell}}{\partial t^2} = \frac{\chi^{(3)}}{c^2} \frac{\partial^2 |\overrightarrow{E}|^2 \overrightarrow{E}}{\partial t^2} \tag{3.126}$$

où l'on pourra considérer le cas

$$\vec{E}(\vec{r},t) = \phi(z,t)\ \vec{U}(\vec{r_\perp},\omega_0)\ e^{i(k_0 z-\omega_0 t)} + \text{c.c.} \quad . \tag{3.127}$$

En se rappelant que $\chi^{(3)}$ est d'ordre ε^2, que les dérivées de ϕ sont d'ordre ε, il est possible de mener les calculs jusqu'à l'ordre ε^2. Dans la suite nous omettrons les signes $\rightarrow$ sur le champ électrique et sur U car nous ne considérerons qu'une seule composante du champ.

Le terme de droite de l'équation (3.126) donne facilement

$$\frac{\chi^{(3)}}{c^2}\frac{\partial^2|E|^2E}{\partial t^2} \simeq -\frac{\omega_0^2}{c^2}\chi^{(3)}|\phi|^2\phi\ U(\vec{r_\perp}=0,\omega_0)\ e^{i(k_0 z-\omega_0 t)} \quad , \tag{3.128}$$

où $|U|^2 = 1$ sur l'axe de la fibre. Considérons à présent les différents termes du membre de gauche de cette équation. On a

$$\nabla^2\vec{E} = \nabla^2\phi U e^{i(k_0 z-\omega_0 t)} + 2\overrightarrow{\nabla\phi}.\vec{\nabla}U e^{i(k_0 z-\omega_0 t)} + \phi\nabla^2\left(U e^{i(k_0 z-\omega_0 t)}\right) \tag{3.129}$$

$$= \frac{\partial^2\phi}{\partial z^2}U e^{i(k_0 z-\omega_0 t)} + 2i\frac{\partial\phi}{\partial z}k_0 U e^{i(k_0 z-\omega_0 t)} + \phi\nabla^2\left(U e^{i(k_0 z-\omega_0 t)}\right) \tag{3.130}$$

puisque le gradient de U, qui ne dépend spatialement que de $\vec{r_\perp}$, est orthogonal à l'axe z.

Le calcul de $\partial^2\vec{D_\ell}/\partial t^2$ nécessite quelques précautions, car si nous introduisons la *non-linéarité* dans l'équation, nous ne devons pas négliger la *dispersion* sous peine d'arriver à des solutions conduisant à des ondes de choc. Pour cela, il est utile de repasser temporairement dans l'espace de Fourier en introduisant l'opérateur transformée de Fourier inverse $\mathcal{F}^{-1}$, de façon à écrire

$$D(z,t) = \mathcal{F}^{-1}\left[\epsilon(\omega)E(z,\omega)\right] \quad . \tag{3.131}$$

Étant donné sa forme de paquet d'ondes, le champ électrique $E(z,\omega)$ a un spectre fortement piqué sur la pulsation ω_0, ce qui suggère de développer $\epsilon(\omega)$ autour de sa valeur en ω_0 ; il faut aller jusqu'au deuxième ordre pour rester cohérent avec les développements précédents, et l'on obtient

$$\begin{aligned} D(z,t) &= \mathcal{F}^{-1}\left[\left(\epsilon(\omega_0) + (\omega-\omega_0)\frac{\partial\epsilon}{\partial\omega}_{|\omega_0} + \frac{(\omega-\omega_0)^2}{2}\frac{\partial^2\epsilon}{\partial\omega^2}_{|\omega_0} + \ldots\right)E(z,\omega)\right] \\ &= \epsilon(\omega_0)\mathcal{F}^{-1}\left[E(z,\omega)\right] + \frac{\partial\epsilon}{\partial\omega}_{|\omega_0}\mathcal{F}^{-1}\left[(\omega-\omega_0)E(z,\omega)\right] \\ &\qquad + \frac{1}{2}\frac{\partial^2\epsilon}{\partial\omega^2}_{|\omega_0}\mathcal{F}^{-1}\left[(\omega-\omega_0)^2E(z,\omega)\right] \quad . \end{aligned} \tag{3.132}$$

L'équation (3.123) pour $\Omega = \omega - \omega_0$, permet d'écrire

$$\mathcal{F}^{-1}\left[(\omega-\omega_0)E(z,\omega)\right] = U(\omega_0)\, e^{i(k_0 z-\omega_0 t)}\, \mathcal{F}^{-1}\left[\int_{\Delta\Omega} \mathrm{d}\Omega\ \Omega\phi(\Omega)\ e^{i[Q(\Omega)z-\Omega t]}\right]$$
$$= U(\omega_0)\, e^{i(k_0 z-\omega_0 t)}\, \frac{\partial \phi}{\partial t} \quad . \qquad (3.133)$$

En procédant de manière identique pour le terme en $(\omega-\omega_0)^2$, on obtient finalement

$$D(z,t) = \left[\epsilon(\omega_0)\phi(z,t) + i\frac{\partial \epsilon}{\partial \omega}_{|\omega_0}\frac{\partial \phi}{\partial t} - \frac{1}{2}\frac{\partial^2 \epsilon}{\partial \omega^2}_{|\omega_0}\frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2}\right] U(\omega_0)\, e^{i(k_0 z-\omega_0 t)} \quad . \qquad (3.134)$$

On a bien une expression d'ordre ε^2 puisqu'elle comporte la dérivée seconde de ϕ. Il reste encore quelques étapes à franchir. On calcule $\partial^2 D(z,t)/\partial t^2$ en négligeant toutes les dérivées de ϕ d'ordre supérieur à 2 puisque l'on fait un calcul à l'ordre ε^2. On trouve

$$\frac{\partial^2 D(z,t)}{\partial t^2} = \left[-\omega_0^2\epsilon(\omega_0)\phi - 2i\omega_0\left(\epsilon + \frac{\omega_0}{2}\frac{\partial \epsilon}{\partial \omega}\right)\frac{\partial \phi}{\partial t}\right.$$
$$\left. + \left(\epsilon + 2\omega_0\frac{\partial \epsilon}{\partial \omega} + \frac{\omega_0^2}{2}\frac{\partial^2 \epsilon}{\partial \omega^2}\right)\frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2}\right] U(\omega_0)\, e^{i(k_0 z-\omega_0 t)} \quad . \qquad (3.135)$$

C'est en reportant les trois expressions (3.128), (3.130) et (3.135) dans l'équation (3.126) que l'on peut aboutir, *enfin*, au résultat. On obtient tout d'abord un terme proportionnel à ϕ mais avec un préfacteur qui s'annule grâce à l'équation (3.118) qui donne la structure spatiale de l'onde. On peut simplifier par le facteur $U\ e^{i(k_0 z-\omega_0 t)}$, qui apparaît dans tous les termes restants, pour aboutir à l'équation donnant l'évolution temporelle de l'enveloppe

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} + 2ik_0\frac{\partial \phi}{\partial z} + \frac{2i\omega_0}{\epsilon_0 c^2}\left(\epsilon + \frac{\omega_0}{2}\frac{\partial \epsilon}{\partial \omega}\right)\frac{\partial \phi}{\partial t} - \frac{1}{\epsilon_0 c^2}\left(\epsilon + 2\omega_0\frac{\partial \epsilon}{\partial \omega} + \frac{\omega_0^2}{2}\frac{\partial^2 \epsilon}{\partial \omega^2}\right)\frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2}$$
$$+ \frac{\omega_0^2}{c^2}\chi^{(3)}|\phi|^2\phi = 0 \quad . \qquad (3.136)$$

On arrive ainsi à une équation dont les coefficients ont une allure bien compliquée de prime abord mais auxquels on peut donner une signification physique qui va permettre quelques simplifications.

Considérons la relation de dispersion des ondes électromagnétiques, en propagation libre, dans le milieu diélectrique de la fibre dans lequel la célérité des ondes est c_{milieu}

$$k^2 = \frac{\omega^2}{c^2_{\text{milieu}}} = \frac{\omega^2\epsilon(\omega)}{c^2\epsilon_0} \quad . \qquad (3.137)$$

On en déduit

$$\frac{\partial k}{\partial \omega} = \frac{1}{v_g} = \frac{\omega \epsilon(\omega)}{kc^2\epsilon_0} + \frac{1}{2k}\frac{\omega^2}{c^2\epsilon_0}\frac{\partial \epsilon}{\partial \omega} \tag{3.138}$$

où v_g est la vitesse de groupe d'un paquet d'ondes centré autour de la pulsation ω. Le terme en $\partial\phi/\partial t$ de l'équation (3.136) s'exprime par conséquent simplement en fonction de $1/v_g$.

On a en outre

$$\frac{\partial}{\partial \omega}\left(\frac{k}{v_g}\right) = \frac{1}{v_g}\underbrace{\frac{\partial k}{\partial \omega}}_{1/v_g} + k\frac{\partial}{\partial \omega}\left(\frac{1}{v_g}\right) = \frac{\epsilon(\omega)}{c^2\epsilon_0} + \frac{2\omega}{c^2\epsilon_0}\frac{\partial \epsilon}{\partial \omega} + \frac{\omega^2}{2c^2\epsilon_0}\frac{\partial^2 \epsilon}{\partial \omega^2} \quad . \tag{3.139}$$

Pour $\omega = \omega_0$, on retrouve le préfacteur de $\partial^2\phi/\partial t^2$, de sorte que l'équation (3.136) s'écrit finalement

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} + 2ik_0\left[\frac{\partial \phi}{\partial z} + \frac{1}{v_g}\frac{\partial \phi}{\partial t}\right] - k_0\frac{\partial}{\partial \omega}\left(\frac{1}{v_g}\right)\frac{\partial^2\phi}{\partial t^2} - \frac{1}{v_g^2}\frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} + \frac{\omega_0^2}{c^2}\chi^{(3)}|\phi|^2\phi = 0 \quad , \tag{3.140}$$

et rappelle fortement l'équation de NLS à un changement de repère près.

Si l'on négligeait la non-linéarité (dernier terme) et la dispersion de vitesse de groupe alors la solution serait simplement

$$\phi(z,t) = \phi\left(t - \frac{z}{v_g}\right) = \phi(\tau) \qquad \text{en posant} \qquad \tau = t - \frac{z}{v_g} \quad . \tag{3.141}$$

Cette expression montre que sans dispersion ni non-linéarité, l'enveloppe se propage sans déformation à la vitesse de groupe v_g, conformément à sa définition. Dans ce cas, si l'on observait le passage de l'enveloppe en un point quelconque de la fibre, on verrait toujours la même fonction, simplement décalée dans le temps de la quantité z/v_g selon le point d'observation. Cela suggère de faire un changement de repère pour passer aux variables

$$\tau = t - \frac{z}{v_g} \qquad \text{et} \qquad \xi = z \quad . \tag{3.142}$$

En l'absence de dispersion et non-linéarité ϕ ne dépendrait que de τ et non de ξ. Le rétablissement de la non-linéarité et de la dispersion rend l'enveloppe dépendante en général du point d'observation, mais on peut prévoir que, dans le nouveau repère, la dépendance en ξ sera très lente. Il est raisonnable de faire l'hypothèse que la variation en ξ est d'un ordre plus faible que la variation de ϕ en fonction de z dans le repère lié à la fibre, que nous avions supposée d'ordre ε.

Avec les nouvelles variables, on a

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} = \frac{\partial^2 \phi}{\partial \xi^2} - \frac{2}{v_g}\frac{\partial^2 \phi}{\partial \xi \partial \tau} + \frac{1}{v_g^2}\frac{\partial^2 \phi}{\partial \tau^2} \quad . \tag{3.143}$$

En tenant compte du fait que la variation de ϕ par rapport à τ est d'ordre ε (comme sa variation par rapport à t) et que sa variation avec ξ est d'ordre ε^2, en restant à l'ordre ε^2 auquel nous menons les calculs, la dérivée $\partial^2\phi/\partial z^2$ donne simplement

$$\frac{\partial^2\phi}{\partial z^2} = \frac{1}{v_g^2}\frac{\partial^2\phi}{\partial\tau^2} \quad , \tag{3.144}$$

ce qui simplifie l'équation (3.140) en

$$i\frac{\partial\phi}{\partial\xi} - \frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial\omega}\left(\frac{1}{v_g}\right)\frac{\partial^2\phi}{\partial\tau^2} + \frac{\omega_0^2}{2k_0c^2}\chi^{(3)}|\phi|^2\phi = 0 \quad . \tag{3.145}$$

C'est donc une équation de NLS, fonction des variables $\xi = z$ et $\tau = t - z/v_g$, dans laquelle les rôles du temps et de l'espace sont échangés par rapport à l'équation NLS habituelle. Comme nous l'avons vu précédemment, cette équation possède la solution soliton suivante :

$$\phi = \phi_0 \operatorname{sech}\left[\sqrt{\frac{Q}{2P}}\ \phi_0\xi\right] e^{i\frac{Q\phi_0^2}{2}z} \quad . \tag{3.146}$$

Remarques :

– Le calcul tel que nous l'avons conduit fait penser à un développement en échelles multiples. A. Newell et J. Maloney [115] l'ont confirmé, au prix d'un calcul encore plus lourd, mais sans avoir à supposer *a priori* que $\partial\phi/\partial\xi$ est d'ordre ε^2.

– On peut obtenir l'équation de NLS dans la fibre optique de façon beaucoup plus rapide à partir de la relation de dispersion développée autour de ω_0, en tenant compte des effets non-linéaires qui induisent une dépendance de k en fonction de l'amplitude du champ électrique. Compte tenu de l'étude que nous avions faite pour la polarisation du milieu, qui avait montré que l'indice optique dépend du carré du module du champ, on prévoit que k dépend de $|\phi|^2$. Son développement donne

$$k\left(\omega, |\phi|^2\right) = k_0(\omega_0) + \frac{\partial k}{\partial\omega}(\omega-\omega_0) + \frac{1}{2}\frac{\partial^2 k}{\partial\omega^2}(\omega-\omega_0)^2 + \frac{\partial k}{\partial|\phi|^2}|\phi|^2 = 0 \quad , \tag{3.147}$$

c'est-à-dire

$$(k - k_0) - (\omega - \omega_0)\frac{1}{v_g} - \frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial\omega}\left(\frac{1}{v_g}\right)(\omega - \omega_0)^2 - \frac{\partial k}{\partial|\phi|^2}|\phi|^2 = 0 \quad . \tag{3.148}$$

Si l'on interprète cette relation comme la relation de dispersion associée à une équation d'onde, pour une onde centrée autour de la pulsation ω_0 et du vecteur d'onde k_0, on associe

$$(k-k_0) \text{ à } \frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial z}, \quad (\omega-\omega_0) \text{ à } -\frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial t} \quad \text{et} \quad (\omega-\omega_0)^2 \text{ à } -\frac{\partial^2}{\partial t^2} \tag{3.149}$$

appliqués à ϕ. Cette relation de dispersion serait donc donnée par l'équation

$$i\left(\frac{\partial\phi}{\partial z}+\frac{1}{v_g}\frac{\partial\phi}{\partial t}\right)+\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial\omega}\left(\frac{1}{v_g}\right)\frac{\partial^2\phi}{\partial t^2}+\frac{\partial k}{\partial|\phi|^2}|\phi|^2\phi=0 \quad , \qquad (3.150)$$

qui est identique à l'équation (3.140) si l'on omet les deux termes, $(\partial^2\phi/\partial z^2)$ et $(1/v_g^2)(\partial^2\phi/\partial t^2)$ qui sont d'ordre supérieur à deux, et ne peuvent donc pas apparaître dans cette dérivation où le développement de k par rapport à ω est d'ordre 2.

La méthode à partir de la relation de dispersion est donc idéale pour parvenir à l'équation de NLS ... si l'on connaît déjà le résultat ! Mais elle ne permet pas d'obtenir explicitement tous les coefficients de l'équation comme le terme non-linéaire en fonction de $\chi^{(3)}$. Cependant, même si elle a ses limites, la méthode est très intéressante dans la mesure où elle permet de prévoir simplement si un système physique est décrit par une équation de NLS.

– L'équation de NLS que nous avons obtenue par le calcul direct fait apparaître la vitesse de groupe v_g, définie à partir de la relation de dispersion en espace libre alors que son obtention, par la méthode consistant à développer $k(\omega)$, fait apparaître la vitesse de groupe dans la fibre, ce qui est le résultat correct. L'origine de la différence se situe dans l'approximation $\vec{\nabla}.\vec{E}=0$, utilisée pour séparer les différentes composantes de $\vec{E}$. Si l'on ne fait pas cette approximation, il faut alors traiter simultanément [115] les trois composantes du champ électrique $\vec{E}$. Le calcul, plus lourd, mais au principe identique, fait apparaître la vitesse de groupe dans la fibre, la dispersion de vitesse de groupe $\partial(1/v_g)/\partial\omega$ ayant alors deux origines : la dispersion provenant du matériau lui-même et une dispersion géométrique, liée aux conditions aux limites transversales.

3.6.4 La confrontation avec l'expérience

L'équation de NLS pour la fibre optique a été proposée [70] par les deux théoriciens, A. Hasegawa et F. Tappert, en 1973 mais les premières observations expérimentales n'ont été réalisées qu'en 1980 par L. Mollenauer [110] car plusieurs problèmes techniques ont dû être surmontés :

- Disposer de fibres monomodes, très fines et avec de faibles pertes, dont la fabrication n'est que très récente.
- Se placer dans les conditions où l'équation de NLS (3.145) prévoit des solitons, c'est-à-dire lorsque l'inégalité $PQ > 0$ est vérifiée. Or, comme dans les diélectriques on a $\chi^{(3)} > 0$, le paramètre Q est forcément positif, ce qui nécessite d'avoir $\partial(1/v_g)/\partial\omega < 0$ pour que P soit positif. Cela correspond à une région dite de *dispersion anormale*, puisque pour les matériaux courants $\partial(1/v_g)/\partial\omega$ est généralement positif. Comme le montre la figure 3.6, une solution pour avoir P positif est de travailler avec une longueur d'onde λ supérieure à 1,3 μm (c'est-à-dire dans le proche infrarouge). Une autre possibilité est d'utiliser la dispersion géométrique.

C'est la première solution qui a été retenue dans les premières expériences, en utilisant des lasers Yag au néodyme ; la longueur d'onde principale est à $\lambda = 1{,}06\ \mu$m mais il existe une raie moins intense à $\lambda = 1{,}32\ \mu$m. C'est cette seconde raie qui a été utilisée au début avec une fibre dont le zéro de dispersion était situé à 1,27 μm. De nos jours, on utilise des fibres micro-structurées, dites à cristal photonique, qui possèdent un zéro de dispersion λ_{ZD} dans le visible. Dans ces conditions, l'expérience confirme que l'équation de NLS est une très bonne description du comportement d'une impulsion lumineuse envoyée dans la fibre.

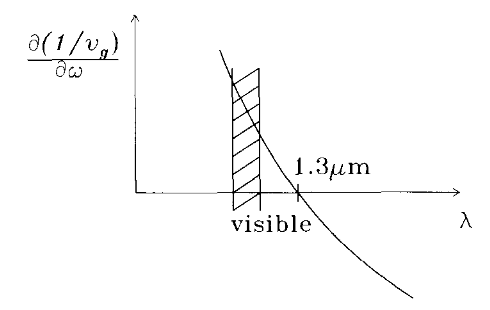


FIG. 3.6 – Évolution schématique de la dispersion de la vitesse de groupe en fonction de la longueur d'onde λ pour une fibre de silice.

Satsuma et Yajima [137] ont étudié l'évolution d'une condition initiale de la forme

$$\phi = a\ \phi_0 \operatorname{sech}\left(\sqrt{\frac{Q}{2P}}\phi_0 \tau\right) \tag{3.151}$$

c'est-à-dire, au préfacteur a près, la solution soliton de NLS (3.42) lorsqu'on la place à l'entrée d'une fibre ($\xi = 0$). Ils ont alors montré que si $a \in [0,5; 1,5]$, une telle impulsion donne naissance à un soliton accompagné d'ondes qui se dispersent. Pour $a < 1$, c'est un soliton d'amplitude plus faible que l'impulsion initiale qui émerge. Comme lors de l'étude des lignes électriques, on observe que l'obtention d'un soliton ne nécessite pas une condition initiale parfaitement adaptée et que la probabilité de le générer est donc grande. Ainsi, pour des valeurs des paramètres de l'équation de NLS qui correspondent à celles d'une fibre, une impulsion d'une durée d'une picoseconde (10^{-12} s) avec une puissance crête de 1,6 W correspond à la création d'un soliton. Si la puissance crête se situe entre 0,4 et 3,6 W, l'analyse de Satsuma et Yajima, confirmée par l'expérience, montre que l'on obtiendra encore un soliton.

Cependant la propagation d'un soliton n'est pas un test très sensible de la validité de la description de NLS car, si l'on avait une faible distorsion au cours de la propagation, elle serait difficile à détecter compte tenu des erreurs

expérimentales. L'obtention de solutions *multisolitons* est en revanche un test beaucoup plus sensible. Les calculs de Satsuma et Yajima [137] montrent que le nombre de solitons générés par une condition initiale comme (3.151) est le plus grand entier N tel que $N \leq a + 1/2$. Les cas $N = 2$ et $N = 3$ sont particulièrement intéressants car la solution analytique, dont l'expression est compliquée, peut être vue comme un ensemble de deux ou trois solitons qui se propagent ensemble, en oscillant l'un par rapport à l'autre de la même façon que le breather de SG.

En raison de cette oscillation interne, lorsque les solitons qui composent la solution se superposent exactement, l'amplitude devient très grande et la solution très étroite car la localisation non-linéaire est intense. Ce phénomène se reproduit régulièrement avec une période spatiale de récurrence caractéristique de la condition initiale. L'observation de ce phénomène constitue alors un test *très sensible de la validité de la description de NLS* [140]. Ce rétrécissement de l'impulsion est d'autant plus marqué que le nombre de solitons dans la solution multisolitons est important. Il a été étudié expérimentalement [141] jusqu'à $N = 13$!

Ce mécanisme de compression d'impulsion est utilisé dans le « *laser à solitons* », en insérant une fibre optique dans une cavité laser. Il est à la base des lasers femtosecondes, que l'on réalise actuellement.

3.6.5 Application aux communications par fibre optique

Malgré ses incontestables succès pour expliquer les expériences, l'équation NLS que nous avons écrite ne suffit pas pour décrire toutes les observations qui interviennent dans les communications à grande distance car des phénomènes même très faibles finissent par avoir des effets cumulatifs importants quand on s'intéresse à une propagation sur des milliers de kilomètres. Il faut alors lui ajouter un certain nombre de termes supplémentaires. On peut le voir en poursuivant le développement (3.147) de la relation de dispersion

$$\begin{aligned} k\left(\omega, |\phi|^2\right) - k_0(\omega_0) = & \frac{\partial k}{\partial \omega}(\omega - \omega_0) + \frac{1}{2}\frac{\partial^2 k}{\partial \omega^2}(\omega - \omega_0)^2 + \frac{\partial k}{\partial |\phi|^2}|\phi|^2 \\ & + \frac{1}{6}\frac{\partial^3 k}{\partial \omega^3}(\omega - \omega_0)^3 + \frac{\partial^2 k}{\partial \omega \partial |\phi|^2}(\omega - \omega_0)|\phi|^2 \quad . \end{aligned} \tag{3.152}$$

Les deux termes supplémentaires rajoutent à l'équation de NLS

$$-\frac{i}{6}\frac{\partial^3 k}{\partial \omega^3}\frac{\partial^3 \phi}{\partial t^3} + i\left(\frac{\partial^2 k}{\partial \omega \partial |\phi|^2}\right)\frac{\partial\left(|\phi|^2 \phi\right)}{\partial t} \quad . \tag{3.153}$$

Il faut, en outre, tenir compte des pertes dans la fibre, associées à l'existence d'une partie imaginaire dans $\epsilon(\omega)$ qui donne un terme en $i\,\Gamma\phi$ dans l'équation de NLS.

La contribution de ces différents termes peut être étudiée précisément par un calcul de perturbation de l'équation de NLS [69]. Comme on peut s'y attendre, le terme dissipatif est responsable d'une décroissance exponentielle de l'amplitude du soliton alors que le terme dispersif supplémentaire apporte une contribution à la vitesse de propagation du soliton qui dépend de son amplitude. Le dernier terme de l'expression (3.153) a peu d'effet sur la propagation d'un seul soliton mais il déstabilise des solutions multisolitons en provoquant la séparation des solitons qui les composent [84].

Enfin, il faut encore tenir compte de l'interaction éventuelle entre les différentes polarisations du champ électromagnétique si la fibre possède une biréfringence. L'ensemble de ces effets a été étudié précisément, non seulement de manière théorique mais aussi expérimentalement, et l'exemple des fibres optiques illustre très bien l'intérêt d'une collaboration étroite entre théorie et expérience, ou entre science fondamentale et science appliquée.

Nous avons étudié les solutions solitons des fibres optiques dans le régime de dispersion anormale. Le régime de dispersion normale ($P < 0$, $Q > 0$) permet également d'avoir une solution de type soliton [70]. Il s'agit de la solution « dark soliton » (également appelée soliton trou ou soliton noir) représentée sur la figure 3.7, qui correspond à une diminution localisée de l'amplitude

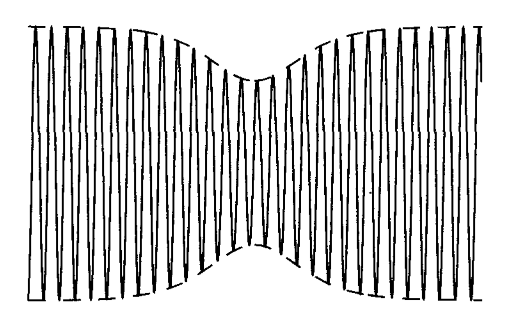


FIG. 3.7 – Allure schématique d'un soliton noir ou « dark soliton ».

d'une onde plane. Sa densité d'énergie n'est pas localisée et ce n'est donc pas un soliton dans sa définition la plus stricte. De telles excitations ont été mises en évidence expérimentalement grâce à des trains d'ondes très longs mais évidemment finis [82].

3.7 Auto-focalisation en optique : équation NLS à deux dimensions spatiales

Dans le cas de la propagation de solitons dans les fibres on utilise des intensités modérées. C'est pour cela que les effets non-linéaires sont sensibles dans

la direction de propagation z par un effet cumulatif mais que l'on a pu négliger leur influence dans la direction transversale. Lorsque l'on travaille avec des intensités beaucoup plus importantes (ou dans des matériaux fortement non-linéaires comme les cristaux liquides), les effets non-linéaires peuvent modifier fortement la distribution transversale du champ électrique et conduire à un phénomène d'auto-focalisation (fig. 3.8).

Étudions la propagation d'un faisceau lumineux dans un milieu non-linéaire que nous considérerons comme illimité car ses dimensions transversales sont très supérieures à la taille du faisceau. On fera également l'hypothèse que le faisceau est *monochromatique* avec une extension spatiale très supérieure à la longueur d'onde du rayonnement utilisé et qu'il est *polarisé rectilignement* de sorte que le champ électrique n'a qu'une seule composante :

$$E = \phi(x, y, z)\, e^{i(k_0 z - \omega_0 t)} + \text{c.c.} \quad , \tag{3.154}$$

où la fonction ϕ traduit la distribution de champ dans le faisceau.

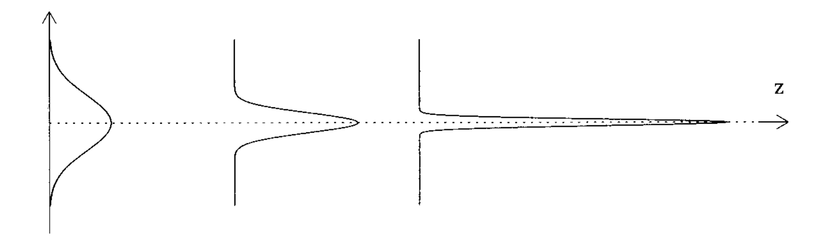


FIG. 3.8 – Évolution schématique de l'intensité du champ en trois points d'un matériau non-linéaire.

L'équation de propagation dans le milieu non-linéaire correspond à l'équation (3.126), écrite pour une seule composante,

$$\nabla^2 E - \frac{1}{\epsilon_0 c^2}\frac{\partial^2 D_L}{\partial t^2} = \frac{\chi^{(3)}}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}|E|^2 E \quad . \tag{3.155}$$

Comme nous considérons ici une onde monochromatique, le calcul est beaucoup plus simple que pour le paquet d'ondes car on peut utiliser tout simplement l'égalité : $D_\ell = \epsilon(\omega_0)E$. Comme précédemment, l'emploi de règles simples d'analyse vectorielle donne, en outre,

$$\nabla^2 E = \nabla^2 \phi\, e^{i(k_0 z - \omega_0 t)} + \left(2ik_0 \frac{\partial \phi}{\partial z} - k_0^2 \phi\right) e^{i(k_0 z - \omega_0 t)} \quad . \tag{3.156}$$

En reportant cette expression dans l'équation de propagation (3.155) et en utilisant la relation de dispersion $k_0^2 = \omega_0^2 \epsilon(\omega)/c^2\epsilon_0$, on obtient

$$2ik_0 \frac{\partial \phi}{\partial z} + \nabla^2 \phi + \frac{\omega_0^2 \chi^{(3)}}{c^2}|\phi|^2 \phi = 0 \quad , \tag{3.157}$$

qui appartient à la classe d'équations qui s'écrivent

$$i\frac{\partial \phi}{\partial z} + P\nabla^2\phi + Q|\phi|^2\phi = 0 \qquad (3.158)$$

où l'opérateur ∇^2 est un opérateur de dimension D.

Ainsi pour $D = 1$, on retrouve une équation de NLS (avec une seconde variable spatiale au lieu de la variable temporelle), qui possède des solutions solitons si le produit PQ est positif. C'est cependant un cas très particulier, puisque pour $D > 1$, on observe un phénomène beaucoup plus dramatique que l'instabilité modulationnelle du cas $D = 1$: c'est ce que l'on appelle l'effondrement ou « collapse ». Ainsi, $D = 2$ conduit à l'auto-focalisation en optique et $D = 3$ à l'auto-focalisation dans les plasmas où la variable z est remplacée par le temps.

Pour un faisceau lumineux dans un milieu non-linéaire [162], comparativement au facteur exponentiel de l'expression (3.154) qui varie à l'échelle de la longueur d'onde, la variation de ϕ dans la direction transversale est beaucoup plus lente : typiquement sur une distance de l'ordre du millimètre pour un faisceau laser, au lieu du micromètre pour le facteur exponentiel. On traduit quantitativement cette variation lente en considérant que ϕ est fonction des variables εx et εy, où $\varepsilon \ll 1$. Si le faisceau était parallèle, la conservation de l'énergie impliquerait que ϕ est indépendant de z. Dans le milieu non-linéaire nous allons montrer que la section évolue, mais elle le fait sur des distances bien supérieures aux dimensions transversales du faisceau. On supposera, par conséquent, que ϕ dépend de la variable $\varepsilon^2 z$. On s'intéresse donc à un champ électrique dont l'amplitude est de la forme $\phi(\varepsilon x, \varepsilon y, \varepsilon^2 z)$. Les échelles de variations spatiales transversales et longitudinale étant très différentes, le terme $\nabla^2\phi$ qui apparaît dans les équations de propagation du champ électromagnétique fait intervenir les premières à l'ordre ε^2 et les secondes à l'ordre ε^4, donc négligeables. C'est pourquoi c'est l'équation (3.157) avec ∇^2 en dimension $D = 2$ qui décrit le faisceau dans le milieu non-linéaire,

$$2ik_0\frac{\partial \phi}{\partial z} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} + \frac{\omega_0^2 \chi^{(3)}}{c^2}|\phi|^2\phi = 0 \qquad (3.159)$$

c'est-à-dire une équation de NLS à deux dimensions spatiales pour la répartition transversale de champ électrique.

En symétrie cylindrique, après un changement approprié des échelles, on peut mettre l'équation de NLS 2D sous la forme suivante :

$$2i\frac{\partial \phi}{\partial z} + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial \phi}{\partial r}\right) + |\phi|^2\phi = 0 \qquad (3.160)$$

qui, d'une manière analogue à la version 1D, possède les relations de conservation suivantes [162] :

$$N = \int_0^{+\infty} r|\phi|^2 \mathrm{d}r \qquad (3.161)$$

et

$$H = \int_0^{+\infty} \left(|\nabla\phi|^2 - \frac{1}{2}|\phi|^4 \right) \mathrm{d}r = \int_0^{+\infty} \left(\left|\frac{\partial\phi}{\partial r}\right|^2 - \frac{1}{2}|\phi|^4 \right) r\mathrm{d}r \quad . \quad (3.162)$$

L'équation (3.160) admet un ensemble de solutions exactes de la forme

$$\phi_n(r, z, \lambda) = \lambda R_n(\lambda r)\; e^{i\frac{\lambda^2 z}{2}} \quad (3.163)$$

pourvu que R_n soit solution de l'équation

$$\frac{\mathrm{d}^2 R_n}{\mathrm{d}\xi^2} + \frac{1}{\xi}\frac{\mathrm{d}R_n}{\mathrm{d}\xi} + R_n^3(\xi) - R_n(\xi) = 0 \quad \text{avec} \quad \xi = \lambda r \quad . \quad (3.164)$$

Les fonctions $R_n(\xi)$ sont des fonctions ayant n racines pour les valeurs de ξ positives.

La solution $R_0(\xi)$, présentée dans la figure 3.9(a), décrit une distribution d'intensité pour un faisceau laser pénétrant dans un milieu non-linéaire, mais cette solution est *instable* si l'on part d'une condition initiale qui correspond à une valeur négative de la quantité H définie par (3.162). Cette classe de conditions initiales correspond aux fortes intensités incidentes qui conduisent à une *singularité* au bout d'un parcours de *longueur finie* z_0 dans le milieu non-linéaire.

Le calcul [162] montre en effet qu'au voisinage de la singularité, ϕ se comporte comme

$$\phi(r = 0, z) \sim \frac{A}{(z - z_0)^{2/3}} \quad , \quad (3.165)$$

c'est-à-dire qu'il y a divergence de l'amplitude du champ électrique au centre du faisceau.

Comme, par ailleurs, la norme N, définie par (3.161), est une constante, cette divergence doit nécessairement s'accompagner d'un rétrécissement du diamètre du faisceau, comme le schématise la figure 3.9(b).

La condition $H < 0$ est obtenue quand la puissance incidente est supérieure à la puissance correspondant à la solution ϕ_0, qui correspond donc à une puissance *critique* :

$$P_{\mathrm{cr}} = 2\pi \int_0^{+\infty} r|\phi_0(r, z)|\, \mathrm{d}r \quad . \quad (3.166)$$

Le collapse correspond donc à une situation extrême de *localisation de l'énergie par non-linéarité* dont l'instabilité modulationnelle est un exemple. Dans le cas de l'optique, il apparaît comme une filamentation du faisceau.

Lorsque l'on trouve une telle divergence dans la solution d'une équation correspondant à un problème physique, cela signifie que l'équation cesse d'être

Chapitre 4

Démarche de modélisation : ondes acoustiques ioniques dans un plasma

4.1 Introduction

Dans les chapitres précédents nous avons présenté trois grandes classes d'équations à solitons en les illustrant par des exemples empruntés à la physique macroscopique. L'exposé était donc orienté de l'équation vers le système pouvant l'illustrer.

Bien entendu, l'approche du physicien est différente. Il considère un système réel, donné, et cherche quelle en est la description théorique appropriée. On veut donc aller du système vers l'équation. Celle-ci n'est pas nécessairement unique car elle peut aussi être déterminée par le type d'excitation que l'on applique au système, ou les conditions dans lesquelles on le place. Le cas des lignes électriques nous a déjà montré qu'un même dispositif peut être décrit aussi bien par une équation de KdV que par une équation de NLS. Cependant, cet exemple est artificiel, puisqu'il s'agit d'un système construit spécialement pour posséder de la dispersion car il est constitué de cellules discrètes et de la non-linéarité, car on y incorpore des capacités non-linéaires. Il n'est donc pas étonnant d'y trouver des solitons !

L'objectif de ce chapitre est de montrer comment se fait la démarche de modélisation, c'est-à-dire comment on passe du système physique aux équations qui le décrivent en considérant un exemple réel, beaucoup plus complexe que les lignes électriques, dans lequel il faudra d'abord identifier les phénomènes physiques dominants avant de chercher à les décrire quantitativement. Les ondes acoustiques dans un plasma constituent un exemple intéressant qui montre comment les solitons peuvent intervenir dans un milieu naturel, important aussi bien en physique de la haute atmosphère qu'en astrophysique.

En fin de chapitre, nous discuterons la modélisation en revenant sur des exemples déjà abordés dans les chapitres précédents.

4.2 Le plasma

4.2.1 Physique d'un plasma

La physique des plasmas étudie le comportement des ondes électromagnétiques dans des fluides conducteurs. Un plasma est un milieu constitué d'atomes ionisés et d'électrons sur lesquels le champ électromagnétique exerce des forces qui peuvent induire des déplacements de grande amplitude dans le milieu. Ces mouvements d'ensemble des particules chargées réagissent sur le champ électromagnétique conformément aux lois de Maxwell, et la physique des plasmas doit donc traiter un système complexe de matière et de champs couplés.

Quand on écrit la loi d'Ohm $\overrightarrow{j} = \sigma \overrightarrow{E}$ dans un milieu, on suppose implicitement que les mouvements des charges sous l'action du champ $\overrightarrow{E}$ sont freinés par une force de friction effective que l'on peut écrire $-\gamma m \overrightarrow{v}$, où $\overrightarrow{v}$ est la vitesse d'un porteur et γ une constante qui a les dimensions d'une fréquence. Cette force de friction provient des collisions entre les porteurs et s'il y a des charges fixes comme dans un solide, de la diffusion des porteurs par ces charges. En présence du champ et de la friction effective, les porteurs atteignent une vitesse limite, proportionnelle au champ, d'où la loi d'Ohm. Cette description n'est valable que si la fréquence ν du champ appliqué est très inférieure à γ. Pour des champs électromagnétiques de haute fréquence, les effets inertiels jouent un rôle important dans la dynamique des porteurs et la notion de force de friction effective perd sa valeur. Pour $\nu \gg \gamma$, les électrons et les ions, qui sont accélérés par le champ dans des directions opposées, tendent à se séparer, ce qui donne naissance à des forces électrostatiques importantes qui tendent au contraire à éviter la séparation des charges. Cela peut conduire à des oscillations, appelées oscillations de plasma. Ce domaine de fréquence est celui de la physique des plasmas, alors que la magnétohydrodynamique s'intéresse aux fluides dans lesquels on a des déplacements d'ensemble à des fréquences beaucoup plus basses, sans phénomène de séparation de charges [76].

Le domaine de la physique des plasmas est facilement atteint dans les gaz raréfiés, comme dans la haute atmosphère ou en astrophysique, pour lesquels la densité d'ions et d'électrons est assez faible pour que la diffusion d'un porteur par les autres charges soit peu probable, conduisant à des valeurs faibles pour γ.

Nous allons étudier un plasma d'hydrogène complètement ionisé avec une densité suffisamment basse pour négliger toutes les collisions et ne considérer que les interactions coulombiennes. Le comportement du système est alors

décrit par les équations du mouvement et de conservation des particules de chaque espèce (ions et électrons), et par l'équation de Poisson pour le potentiel électrostatique [92, 93].

Le premier aspect physique que l'on doit considérer est la *mécanique* des porteurs de charge. Écrivons la projection sur l'axe k du *bilan de quantité de mouvement* de l'espèce α (que nous noterons ensuite i pour ions et e pour électrons), c'est-à-dire l'équation de mouvement d'un petit volume de fluide :

$$\rho_\alpha \frac{\mathrm{d}v_{\alpha,k}}{\mathrm{d}t} = \rho_\alpha \left[\frac{\partial v_{\alpha,k}}{\partial t} + \sum_j v_{\alpha,j} \frac{\partial v_{\alpha,k}}{\partial x_j} \right] = F_{\alpha,k} - \sum_j \frac{\partial P_{\alpha,kj}}{\partial x_j} \qquad (4.1)$$

en notant :

- ρ_α la masse volumique, n_α la densité de particules, m_α la masse et q_α la charge de l'espèce α, égale à $+e$ pour les protons du plasma d'hydrogène et $-e$ pour les électrons.
- $F_{\alpha,k}$, la composante de la force par unité de volume dûe au champ électrique $\overrightarrow{F} = n_\alpha q_\alpha \overrightarrow{E}$ puisqu'il y a n_α particules de charge q_α dans le volume de fluide considéré.
- $P_{\alpha,kj}$ correspond au tenseur de pression dans le fluide de particules α mais comme la viscosité du plasma est supposée nulle, il se réduit à la pression hydrostatique P_α et il est diagonal. Il ne restera par conséquent que le terme $\partial P_\alpha / \partial x_k$.
- Le plasma est globalement neutre, *i.e.* $\int n_i(\mathbf{x})\mathrm{d}\mathbf{x} = \int n_e(\mathbf{x})\mathrm{d}\mathbf{x}$, mais en revanche, aux fréquences élevées $\nu \gg \gamma$ que nous considérons, il n'y a pas neutralité au niveau local, c'est-à-dire que les deux densités $n_i(\mathbf{x})$ et $n_e(\mathbf{x})$ sont différentes (où nous avons désigné par $\mathbf{x}$ l'ensemble des coordonnées de position d'une charge).
- La densité est supposée suffisamment basse pour que les collisions soient négligeables, les particules n'interagissant alors que par la force due au champ électrique moyen, qui est en fait une force auto-cohérente puisque le champ dépend de la position des particules.

On notera que la vitesse $\overrightarrow{v_\alpha}(\mathbf{x}, t)$ varie, d'une part, en raison de sa dépendance explicite par rapport au temps, mais, d'autre part, en fonction des mouvements du fluide, ce qui donne naissance aux deux contributions dans sa dérivée totale par rapport au temps, comme il est d'usage en hydrodynamique.

On obtient par conséquent l'équation de bilan de quantité de mouvement suivante :

$$\frac{\partial \overrightarrow{v_\alpha}}{\partial t} + \left(\overrightarrow{v_\alpha} . \overrightarrow{\nabla} \right) \overrightarrow{v_\alpha} = -\frac{q_\alpha}{m_\alpha} \overrightarrow{\nabla} \varphi - \frac{1}{n_\alpha m_\alpha} \overrightarrow{\nabla} P_\alpha \quad , \qquad . \ (4.2)$$

où l'on a introduit le potentiel électrique φ dont dérive le champ électrique, $\overrightarrow{E} = -\overrightarrow{\nabla} \varphi$.

Écrivons maintenant la *conservation du nombre de particules*, *i.e.* le bilan de conservation des masses de chaque espèce :

$$\frac{\partial \rho_\alpha}{\partial t} + \vec{\nabla} . (\rho_\alpha \vec{v_\alpha}) = 0 \qquad \text{soit} \qquad \frac{\partial n_\alpha}{\partial t} + \vec{\nabla} . (n_\alpha \vec{v_\alpha}) = 0 \quad . \tag{4.3}$$

Le second aspect physique important dans un plasma est *l'électromagnétisme du milieu*. *L'équation de Poisson* permet de compléter le système d'équations sous la forme

$$\Delta\varphi = \nabla^2 \varphi = -\frac{\rho}{\varepsilon_0} = -\frac{n_i e - n_e e}{\varepsilon_0} \quad . \tag{4.4}$$

4.2.2 Températures et équations d'état

Le rapport $\mu = m_e/m_i$ des masses électronique et ionique permet d'envisager deux types de dynamique dans un plasma non magnétisé, selon l'échelle de temps considérée, définie par l'une des deux fréquences plasma $\omega_{p,\alpha}^2 = n_\alpha q_\alpha^2 / m_\alpha \varepsilon_0$:

- l'une, due aux électrons rapides, est rythmée par la pulsation électronique ω_{pe} où les ions sont figés en première approximation et n'apportent qu'une contribution aux équations en $\sqrt{\mu}$ en deuxième approximation ;
- l'autre, due aux ions, est rythmée par la pulsation ionique ω_{pi}. À cette échelle de fréquence, les électrons peuvent être considérés comme infiniment mobiles en première approximation.

C'est le second cas que nous considérerons ici, c'est-à-dire que nous nous intéressons au domaine de fréquence des ondes acoustiques *ioniques* dans le plasma. Cela revient à négliger tous les effets inertiels pour les électrons, comme si leur masse était nulle. Leur bilan de quantité de mouvement (4.1) se réduit à un équilibre entre le gradient de pression électronique et la force électrostatique,

$$e\vec{\nabla}\varphi - \frac{1}{n_e}\vec{\nabla} P_e = \vec{0} \quad . \tag{4.5}$$

Comme les électrons sont extrêmement mobiles, leur conductivité thermique est très efficace pour uniformiser la température électronique dans le « gaz » d'électrons que l'on peut considérer comme isotherme avec une bonne approximation. Pour étudier le plasma il faut connaître l'équation d'état du gaz d'électrons. Pour un plasma de faible densité comme celui que nous considérons, l'équation d'état d'un gaz parfait est une très bonne approximation. Elle s'écrit

$$P_e = n_e T_e \quad , \tag{4.6}$$

en exprimant la température en unité d'énergie de sorte que la constante de Boltzmann k_B n'apparaît pas.

En combinant les équations (4.5) et (4.6), on a donc

$$e\overrightarrow{\nabla}\varphi - \frac{T_e}{n_e}\overrightarrow{\nabla} n_e = \overrightarrow{0} \quad , \tag{4.7}$$

qui conduit à l'expression suivante pour la densité électronique

$$n_e = n_0 \, \exp\left(\frac{e\varphi}{T_e}\right) \quad , \tag{4.8}$$

où n_0 est une constante d'intégration.

Pour les ions, qui ont une masse beaucoup plus élevée que les électrons, les effets inertiels sont au contraire très importants. Dans le domaine de fréquences que nous considérons, assez bas pour que l'on puisse exciter des ondes acoustiques ioniques dans le plasma, les fluctuations thermiques dans le mouvement des ions sont négligeables par rapport au mouvement cohérent que leur impose l'onde acoustique ionique. En effet, la vitesse thermique des ions, $v_i = \sqrt{T_i/m_i}$ sera nécessairement faible même dans le cas où la température ionique atteindrait la température électronique T_e. Cela signifie que, dans le bilan de quantité de mouvement des ions, le terme dû au gradient de pression est négligeable devant le terme de force électromagnétique. Négliger le terme de pression, c'est-à-dire supposer $P_i \simeq 0$, revient aussi à supposer $T_i \simeq 0$ puisque P_i et T_i sont liés par l'équation d'état des ions dans un plasma de faible densité qui, comme pour les électrons, est l'équation des gaz parfaits $P_i = n_i T_i$.

À ce niveau, nous avons identifié les différents phénomènes physiques qui interviennent dans la dynamique du plasma, et compte tenu du domaine de fréquences choisi de façon à étudier les ondes acoustiques ioniques, nous avons simplifié les équations données par les lois de la mécanique, de l'électromagnétisme et de la thermodynamique. Dans l'étude qui va suivre, nous considérons le cas où les conditions d'excitation du plasma sont uniformes dans un plan (y, z), c'est-à-dire que seule la coordonnée spatiale x intervient. Dans ce cas, si on note simplement v la vitesse ionique, les équations de mouvement des ions, dans l'approximation $P_i \simeq 0$ se réduisent à :

$$\frac{\partial v}{\partial t} + v\frac{\partial v}{\partial x} = -\frac{e}{m_i}\frac{\partial \varphi}{\partial x} \quad , \tag{4.9}$$

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} = -\frac{e}{\varepsilon_0}(n_i - n_e) \quad , \tag{4.10}$$

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} + \frac{\partial (n_i v)}{\partial x} = 0 \quad . \tag{4.11}$$

auxquelles il faut ajouter l'expression (4.8) de la densité électronique pour disposer d'un ensemble complet d'équations.

4.2.3 Passage à des équations sans dimension

L'étude de la physique du système et la détermination des phénomènes dominants est la première étape, nécessaire, de la modélisation, mais elle est rarement suffisante car les équations auxquelles on arrive ne sont en général pas solubles sous leur forme primitive. Pour pouvoir leur appliquer des méthodes d'approximation, il faut ensuite évaluer correctement le poids des différents termes. Pour cela la meilleure méthode est de passer à des équations sans dimension en introduisant des échelles adaptées au problème.

En l'absence de champ magnétique, un plasma est caractérisé par une seule échelle de longueur, la longueur de Debye $\lambda_D = (\varepsilon_0 T_e / n_o e^2)^{1/2}$ qui est une longueur d'écrantage : à l'équilibre un ion est entouré d'un nuage électronique dont la densité décroît en fonction de la distance r à l'ion en $\exp(-r/\lambda_D)$. Le plasma peut être caractérisé par deux échelles de temps, $\tau_i = 1/\omega_{p,i} = (m_i \epsilon_0 / n_0 e^2)^{1/2}$ l'inverse de la fréquence de plasma ionique et l'inverse de la fréquence de plasma électronique. Pour l'étude des ondes acoustiques ioniques c'est l'échelle de temps ionique τ_i qui est pertinente. Ces deux échelles définissent une échelle naturelle de vitesse $v_s = \lambda_D/\tau_i = (T_e/m_i)^{1/2}$ qui correspond à la vitesse du son dans le plasma. Enfin, l'échelle d'énergie peut être définie par T_e température électronique que nous avons exprimée en unité d'énergie. Cela fixe une échelle naturelle pour le potentiel électrique, T_e/e.

Une application numérique donne une idée de l'ordre de grandeur de ces différentes échelles. Nous prendrons une densité ionique $n_0 = 10^{20}$ m^{-3} qui correspond bien à un plasma peu dense et une température électronique $T_e = 2 \cdot 10^3$ K, assez faible pour un plasma. On obtient alors $\lambda_D = 0,3\,\mu$m, $\tau_i = 7,6 \cdot 10^{-11}$ s et $v_S = 4000$ m/s, c'est-à-dire une vitesse du son tout à fait plausible même si elle est élevée pour des ondes acoustiques classiques.

Les différentes échelles que nous avons définies permettent d'introduire les grandeurs sans dimension suivantes :

$$X = \frac{x}{\lambda_D}, \quad T = \frac{t}{\tau_i}, \quad V = \frac{v}{v_s}, \quad \phi = \frac{e}{T_e}\varphi, \quad N = \frac{n_i}{n_0}, \quad \text{et} \quad N_e = \frac{n_e}{n_0} \quad . \tag{4.12}$$

En écrivant les équations de la dynamique du plasma en fonction de ces nouvelles variables, on obtient un système d'équations sans dimension

$$\text{Eq. (4.8)} \quad \Rightarrow \quad \phi = \ln N_e \tag{4.13}$$

$$\text{Eq. (4.10)} \quad \Rightarrow \quad \phi_{XX} = N_e - N \tag{4.14}$$

$$\text{Eq. (4.11)} \quad \Rightarrow \quad N_T + (NV)_X = 0 \tag{4.15}$$

$$\text{Eq. (4.9)} \quad \Rightarrow \quad V_T + VV_X = -\phi_X \quad . \tag{4.16}$$

4.3 Étude de la dynamique linéaire

Bien que nous ayons montré dans les chapitres précédents l'importance de considérer explicitement les non-linéarités pour étudier un système, dans la démarche de modélisation, il ne faut pas négliger les informations que l'on peut tirer d'une étude des petites perturbations autour d'un état d'équilibre. Outre les résultats sur la réponse du système faiblement perturbé, on pourra en déduire des éléments pour mener l'étude des non-linéarités.

L'état d'équilibre le plus simple pour les ondes acoustiques ioniques dans le plasma correspond à $V = 0$, $\phi = 0$ et $N = N_e = 1$. Considérons de petites perturbations autour de cet état :

$$V = \delta V, \quad N = 1 + \delta N, \quad N_e = 1 + \delta N_e, \quad \text{et} \quad \phi = \delta\phi \quad . \tag{4.17}$$

Pour ces perturbations on peut se contenter de la version *linéarisée* des équations régissant l'évolution de δV, δN, δN_e et $\delta\phi$,

$$\delta\phi = \delta N_e \tag{4.18}$$

$$\delta V_T = -\delta\phi_X \tag{4.19}$$

$$\delta N_T + \delta V_X = 0 \tag{4.20}$$

$$\delta\phi_{XX} = \delta\phi - \delta N \quad , \tag{4.21}$$

dans lesquelles on a déjà tenu compte de l'équation (4.18) pour écrire l'équation (4.21).

En dérivant l'équation (4.19) par rapport à la variable X, on obtient $\delta V_{TX} = -\delta\phi_{XX}$, qui combinée avec l'équation (4.21), conduit à

$$-\delta V_{TX} = \delta\phi - \delta N \quad . \tag{4.22}$$

Si l'on dérive à nouveau cette équation par rapport aux variables X et T, on aboutit à

$$-\delta V_{TTXX} = \delta\phi_{TX} - \delta N_{TX} \tag{4.23}$$

qui donne finalement

$$-\delta V_{TTXX} = -\delta V_{TT} + \delta V_{XX} \tag{4.24}$$

si l'on utilise les dérivées des équations (4.20) et (4.21) par rapport à T et X respectivement.

Cette équation a une solution sous forme d'ondes $\delta V = ae^{i(\omega T - kX)}$ dont la relation de dispersion est

$$\omega^2 = \frac{k^2}{1 + k^2} \quad . \tag{4.25}$$

La figure 4.1, représentant $\omega(k)$, a l'allure habituelle d'une relation de dispersion pour des *ondes acoustiques*, passant par l'origine et tendant vers une

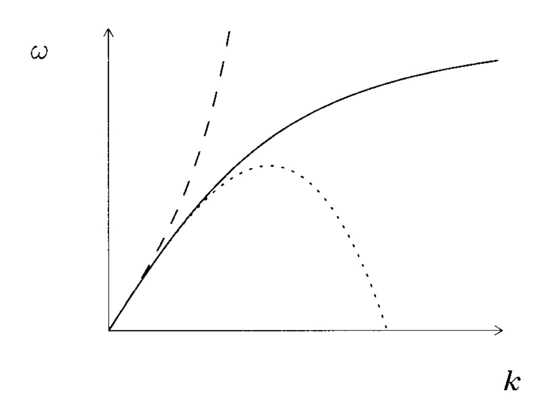


FIG. 4.1 – Relation de dispersion pour les ondes acoustiques ioniques dans un plasma. La ligne continue représente l'évolution de la relation de dispersion (4.25) pour $\omega(k)$. La courbe pointillée correspond à la relation de dispersion (4.47) alors que celle en tirets correspond à celle qui se déduit de l'équation (4.65).

limite $\omega \propto k$ pour les faibles valeurs de k. La relation de dispersion montre aussi que ω^2 est toujours positif, et, par conséquent, une petite perturbation par rapport à l'état d'équilibre conduira toujours à une oscillation qui ne croîtra pas avec le temps. L'état d'équilibre est trouvé *stable* par l'analyse linéaire.

On note de plus que la relation de dispersion conduit à une vitesse de phase

$$v_\varphi = \frac{\omega}{k} = \frac{1}{\sqrt{1+k^2}} \tag{4.26}$$

qui dépend du vecteur d'onde k. Les ondes linéaires dans le plasma sont donc des *ondes dispersives*. Comme, par ailleurs, les équations d'évolution complètes du milieu comportent des termes non-linéaires, on peut s'attendre à rencontrer des situations où dispersion et non-linéarité se compensent. Cela justifie d'autant plus l'intérêt de poursuivre l'étude du système en tenant compte des termes non-linéaires dans les équations d'évolution.

4.4 Étude non-linéaire

4.4.1 Le plasma peut être décrit par l'équation de KdV

L'étude précédente ayant montré la stabilité des ondes acoustiques linéaires dispersives, nous allons nous intéresser désormais aux ondes acoustiques *non-linéaires* en cherchant s'il existe un régime où la dispersion et la non-linéarité peuvent se compenser et conduire à des solitons.

L'étude linéaire peut nous mettre sur la voie car, si l'on développe la relation de dispersion des ondes linéaires pour de faibles valeurs de k,

on trouve

$$\omega(k) = k\left(1 - \frac{1}{2}k^2\right) + \mathcal{O}(k^5) \quad . \tag{4.27}$$

On remarque donc que l'on trouve exactement la forme de relation de dispersion que nous avions présentée en discutant la généralité de l'équation de KdV dans la section 1.7. Cela suggère d'appliquer aux équations (4.13)–(4.16) la méthode qui a conduit à l'équation de KdV dans les exemples que nous avons traités précédemment.

Pour cela, on s'intéresse aux solutions faiblement dispersives, ce qui, pour une relation de dispersion du type (4.27), signifie que l'on se limite à k petit, donc à des solutions dont la variation spatiale est lente. Par ailleurs, nous avons vu dans la section 1.7 qu'il était intéressant de passer dans un repère mobile à la vitesse du son, qui, dans nos variables adimensionnées est égale à l'unité. On introduit donc une variable $\xi = \varepsilon^{\alpha}(X - T)$, où le facteur ε^{α}, avec $\varepsilon \ll 1$, permet d'imposer la variation spatiale lente, la puissance α étant à déterminer ultérieurement. La discussion de la section 1.7 a aussi montré que, pour une relation de dispersion telle que (4.27), la variable temporelle à choisir dans le repère mobile est $\tau = \varepsilon^{3\alpha} T$. La démarche à suivre est d'écrire les équations en termes de ces nouvelles variables et, si l'on cherche à mettre en évidence l'existence éventuelle de solutions solitons, à déterminer α pour que les termes dispersifs et les termes non-linéaires apparaissent au même ordre dans les équations que l'on obtient. On vérifie alors que la valeur $\alpha = 1/2$ est celle qui convient, comme dans le cas des lignes électriques non-linéaires. Comme le calcul général est fastidieux, nous allons nous contenter ici de vérifier que ce choix $\alpha = 1/2$ est approprié.

Introduisons, par conséquent, les échelles spatiale et temporelle lentes suivantes : $\xi = \varepsilon^{1/2}(X - T)$ et $\tau = \varepsilon^{3/2}T$. La définition de ces variables permet d'obtenir l'expression des opérateurs dérivés suivants, $\partial_X = \varepsilon^{1/2}\partial_\xi$ et $\partial_T = -\varepsilon^{1/2}\partial_\xi + \varepsilon^{3/2}\partial_\tau$, qui permettent de réécrire les équations (4.14), (4.15) et (4.16) de la manière suivante :

$$\varepsilon\phi_{\xi\xi} = e^{\phi} - N \tag{4.28}$$

$$\varepsilon N_\tau - N_\xi + (NV)_\xi = 0 \tag{4.29}$$

$$\varepsilon V_\tau - V_\xi + VV_\tau = -\phi_\xi \quad . \tag{4.30}$$

Comme ces équations possèdent des termes à plusieurs ordres, nous allons maintenant effectuer un développement perturbatif, en choisissant un développement autour de l'état d'équilibre de la forme suivante :

$$N = 1 + \varepsilon N_1 + \varepsilon^2 N_2 + \mathcal{O}(\varepsilon^3) \tag{4.31}$$

$$V = 0 + \varepsilon V_1 + \varepsilon^2 V_2 + \mathcal{O}(\varepsilon^3) \tag{4.32}$$

$$\phi = 0 + \varepsilon\phi_1 + \varepsilon^2\phi_2 + \mathcal{O}(\varepsilon^3) \quad . \tag{4.33}$$

En introduisant ces expressions dans les équation (4.28), (4.29) et (4.30), on obtient à **l'ordre** ε,

$$\phi_1 = N_1 \quad , \quad N_{1\xi} = V_{1\xi} \quad \text{et} \quad V_{1\xi} = \phi_{1\xi} \quad , \tag{4.34}$$

qui conduisent à

$$N_1 = \phi_1 = V_1 + A(\tau) \quad , \tag{4.35}$$

où A est une fonction arbitraire de la variable τ, qui doit être prise nulle si l'on cherche des solutions susceptibles de conserver leur amplitude au cours du temps, telles que les solutions solitons.

À l'ordre ε^2, les trois équations conduisent à

$$\phi_{1\xi\xi} = \phi_2 + \frac{1}{2}\phi_1^2 - N_2 \quad , \tag{4.36}$$

$$N_{1\tau} - N_{2\xi} + (N_1 V_1)_\xi + V_{2\xi} = 0 \quad , \tag{4.37}$$

$$V_{1\tau} - V_{2\xi} + V_1 V_{1\xi} = -\phi_{2\xi} \quad . \tag{4.38}$$

En combinant les équations (4.36) et (4.38) avec l'équation (4.35), on aboutit à

$$V_{1\tau} + V_{1\xi\xi\xi} - V_{2\xi} + N_{2\xi} = 0 \quad . \tag{4.39}$$

En ajoutant les équations (4.37) et (4.39), on obtient l'équation de KdV

$$V_{1\tau} + V_1 V_{1\xi} + \frac{1}{2} V_{1\xi\xi\xi} = 0 \quad , \tag{4.40}$$

dont on avait pressenti la validité à partir de la relation de dispersion et de la présence des termes non-linéaires. Elle contient bien dispersion et non-linéarité au même ordre ε^2, ce qui montre *a posteriori* que le choix $\alpha = 1/2$ était judicieux.

Montrons que l'on peut mener le calcul sans faire l'hypothèse simplificatrice $A(\tau) = 0$ et que l'on aboutit toujours, de manière remarquable, à l'équation de KdV. L'équation à l'ordre ε^2, que l'on obtient à partir des équations (4.36), (4.37) et (4.38), *sans* utiliser $N_1 = V_1$, est

$$N_{2\xi} - N_{1\xi} N_1 + N_{1\xi\xi\xi} + V_{1\tau} + V_1 V_{1\xi} = V_{2\xi} \quad . \tag{4.41}$$

En tenant compte de l'équation (4.38) et de la relation $N_1 = V_1 + A(\tau)$, on parvient à

$$V_{1\tau} + \frac{A_\tau}{2} + \frac{1}{2} V_{1\xi\xi\xi} + V_1 V_{1\xi} = 0 \quad . \tag{4.42}$$

En utilisant les nouvelles variables,

$$\eta = \tau, \qquad \chi = \xi + \frac{1}{2}\int_0^\tau A(\alpha)\mathrm{d}\alpha \quad \text{et} \qquad V = V_1 + \frac{A}{2} \quad , \tag{4.43}$$

on obtient alors, après simplifications,

$$V_\eta + V V_\chi + \frac{1}{2} V_{\chi\chi\chi} = 0 \quad . \tag{4.44}$$

C'est-à-dire, à nouveau l'équation de KdV.

4.4.2 La relation de dispersion

Si l'on cherche des solutions de la forme $V = V_0\ e^{i(\Omega\tau\ -\ K\xi)}$ dans l'équation (4.40) linéarisée, on aboutit à la relation de dispersion

$$\Omega = -\frac{K^3}{2} \quad . \tag{4.45}$$

En revenant aux variables initiales X et T, on a donc

$$V = V_0\ e^{i(\Omega\varepsilon^{3/2}T - K\varepsilon^{1/2}(X-T))} \tag{4.46}$$

que l'on doit comparer à l'expression $a\ e^{i(\omega T - kX)}$, utilisée pour obtenir la relation de dispersion (4.25). Par identification, on obtient

$$k = K\varepsilon^{1/2} \qquad \text{et} \qquad \omega = k - \frac{1}{2}k^3 \quad , \tag{4.47}$$

qui correspond bien au développement (4.27) de la relation de dispersion (4.25). La figure 4.1 confirme que la relation de dispersion obtenue par linéarisation des équations physiques du plasma et celle que donne l'équation de KdV coïncident pour les faibles valeurs de k. Conformément au choix de variables que nous avons fait pour l'obtenir, la description de KdV correspond donc bien à des excitations de vecteurs d'ondes $k \ll 1$, c'est-à-dire à de grandes longueurs d'ondes par rapport à la longueur de Debye λ_D.

Il est important de noter que le résultat obtenu ici est l'illustration du résultat général que nous avions présenté dans la section 1.7 : lorsque l'approximation linéaire réduit le système physique à des ondes dispersives qui satisfont, dans la limite des grandes longueurs d'ondes, à une relation de dispersion de la forme $\omega = ak + bk^3$, où a et b sont des constantes, alors *il existe un régime* pour lequel dispersion et non-linéarité se compensent, et pour lequel on pourra obtenir l'équation de KdV. On y parvient par un développement analogue à celui que nous avons présenté ici.

4.5 Obtention de l'équation de NLS

La description par l'équation de KdV combine la dispersion et la non-linéarité dans le plasma sous une forme qui permet d'obtenir des solutions tenant explicitement compte des effets non-linéaires. Elle n'est cependant pas toujours adaptée aux excitations que l'on peut générer dans un plasma en utilisant des ondes électromagnétiques, puisque l'on crée plutôt des paquets d'ondes, et non des impulsions comme les solutions de l'équation de KdV.

Or, nous connaissons une équation qui décrit les « paquets d'ondes non-linéaires ». Il s'agit de l'équation de NLS. Les propriétés physiques du plasma suggèrent que, si l'équation de KdV décrit convenablement les non-linéarités

du plasma, il doit être possible de passer de cette équation à une équation décrivant les paquets d'ondes non-linéaires dans le plasma, c'est-à-dire l'équation de NLS.

Nous allons vérifier que c'est bien le cas, ce qui va de plus montrer que les grandes classes d'équations à solitons que nous avons introduites précédemment ne sont pas déconnectées les unes des autres. Il existe des liens entre ces équations. Nous avons déjà noté une relation entre l'équation de SG et celle de NLS puisque la limite faible amplitude du mode breather de SG donne le soliton NLS. Nous allons établir ici un autre de ces liens en examinant comment, à partir de l'équation de KdV, en effectuant un développement en échelles multiples, puis en traitant successivement les équations correspondant aux différents ordres en ε, on aboutit finalement à une équation de NLS pour l'amplitude.

Cherchons une solution de l'équation (4.40) sous la forme du développement perturbatif

$$V = \varepsilon\theta_1 + \varepsilon^2\theta_2 + \varepsilon^3\theta_3 + ... \quad , \tag{4.48}$$

dans lequel on ne prend pas de terme constant puisque l'état d'équilibre du plasma est obtenu pour $V = 0$. Pour chercher des solutions sous forme de paquets d'ondes, la méthode de choix est la méthode des échelles multiples, car un paquet d'ondes comporte justement plusieurs échelles : une porteuse à variation rapide modulée par une enveloppe à variation plus lente. Nous allons présenter ici l'utilisation de la méthode des échelles multiples dans un cadre plus général que dans le chapitre 3 car c'est une méthode puissante qui a d'autres applications, telles par exemple que l'étude d'une équation de KdV perturbée.

Nous considérons plusieurs échelles de temps $\tau_i = \varepsilon^i\,\tau$ et d'espace $\xi_i = \varepsilon^i\,\xi$, qui vont transformer les opérateurs dérivées de la manière suivante :

$$\partial_\xi = \partial_{\xi_0} + \varepsilon\partial_{\xi_1} + \varepsilon^2\partial_{\xi_2} + ... \tag{4.49}$$

$$\partial_{\xi\xi\xi} = \partial^3_{\xi_0\xi_0\xi_0} + 3\varepsilon\partial^3_{\xi_0\xi_0\xi_1} + 3\varepsilon^2\partial^3_{\xi_0\xi_1\xi_1} + 3\varepsilon^2\partial^3_{\xi_0\xi_0\xi_2} + ... \quad . \tag{4.50}$$

On introduit le développement (4.48) dans l'équation (4.40) avec les variables aux différentes échelles puis on fait l'identification ordre par ordre :

L'ordre ε donne

$$\mathcal{L}\,\theta_1 = \theta_{1\tau_0} + \frac{1}{2}\theta_{1\xi_0\xi_0\xi_0} = 0 \tag{4.51}$$

qui définit un opérateur $\mathcal{L}$ qui sera utile dans la suite, et conduit à la solution

$$\theta_1 = A(\tau_1, \tau_2, ..., \xi_1, \xi_2, ...)\; e^{i(\Omega\tau_0 - K\xi_0)} + \text{c.c.} \tag{4.52}$$

avec la relation de dispersion $\Omega = -K^3/2$ que nous avions déjà trouvée. Il est normal que l'ordre le plus bas du développement perturbatif donne la relation de dispersion linéaire puisqu'à cet ordre on se limite aux termes linéaires.

L'ordre ε^2 conduit à l'équation

$$\theta_{2\tau_0} + \frac{1}{2}\theta_{2\xi_0\xi_0\xi_0} = -\theta_{1\tau_1} - \theta_1\theta_{1\xi_0} - \frac{3}{2}\theta_{1\xi_0\xi_0\xi_1} \tag{4.53}$$

$$\mathcal{L}\,\theta_2 = \mathcal{NL}\,(\theta_1) \tag{4.54}$$

qui fait apparaître à nouveau l'opérateur linéaire $\mathcal{L}$. Nous avons déjà vu au chapitre 3 que, dans le développement perturbatif en échelles multiples, il faut veiller à éviter le présence de termes séculaires, résonants par rapport à l'opérateur $\mathcal{L}$, car ils conduisent à des divergences des termes du développement. L'annulation des termes de l'opérateur non-linéaire $\mathcal{NL}$ de droite susceptibles d'être résonants avec $\mathcal{L}$ donne

$$-A_{\tau_1} + \frac{3K^2}{2}A_{\xi_1} = 0 \qquad i.e. \qquad A_{\tau_1} + v_g A_{\xi_1} = 0 \quad , \tag{4.55}$$

où v_g est la vitesse de groupe des ondes régies par la relation de dispersion trouvée à l'ordre ε. Cette équation exprime par conséquent que, pour les variables à l'ordre 1, la fonction A ne dépend que de $\xi_1' = \xi_1 - v_g\tau_1$, c'est-à-dire que, à cet ordre, elle garde un profil constant quand on passe dans le repère mobile à la vitesse de groupe du paquet d'ondes. On écrira donc l'amplitude A sous la forme

$$A = A(\xi_1 - v_g\tau_1, \xi_2, ..., \tau_2, ...) \quad . \tag{4.56}$$

Après élimination des termes séculaires, l'équation (4.53) se réduit à

$$\theta_{2\tau_0} + \frac{1}{2}\theta_{2\xi_0\xi_0\xi_0} = iKA^2\, e^{2i(\Omega\tau_0 - K\xi_0)} + \text{c.c.} \tag{4.57}$$

dont on cherche une solution particulière de la forme $\theta_2 = B\exp[2i(\Omega\tau_0 - K\xi_0)] + \text{c.c.}$ En remplaçant dans l'équation (4.57), on obtient aisément $B = A^2/3K^2$.

Il est intéressant de noter que dans le passage de sine-Gordon à NLS, on avait appliqué la méthode des échelles multiples de manière similaire. Cependant, à cet ordre là, après élimination des termes séculaires, au lieu de l'équation (4.57), on avait simplement $\mathcal{L}\,\theta_2 = 0$ ce qui permettait de choisir la solution $\theta_2 = 0$, puisque toute autre solution pourrait être incorporée dans la solution de l'ordre supérieur θ_1. La différence provient du fait que la non-linéarité de l'équation de KdV est *quadratique* et non cubique comme pour l'équation de SG.

L'ordre ε^3 conduit à l'équation :

$$\theta_{3\tau_0} + \frac{1}{2}\theta_{3\xi_0\xi_0\xi_0} = \mathcal{L}\,\theta_3 \tag{4.58}$$

$$= -\theta_{2\tau_1} - \theta_{1\tau_2} - \theta_2\theta_{1\xi_0} - \theta_1\theta_{2\xi_0} - \theta_1\theta_{1\xi_1} - \frac{3}{2}\Big[\theta_{1\xi_0\xi_1\xi_1} + \theta_{1\xi_0\xi_0\xi_2} + \theta_{2\xi_0\xi_0\xi_1}\Big] \quad . \tag{4.59}$$

Comme précédemment, on doit annuler les termes résonants du second membre, en $\exp[\pm i(\Omega\tau_0 - K\xi_0)]$, ce qui conduit à :

$$-2A_{\tau_2} + \frac{2i}{3K}|A|^2A + 3iKA_{\xi_1\xi_1} + 3K^2A_{\xi_2} = 0 \quad . \tag{4.60}$$

En se plaçant à nouveau dans le repère mobile à la vitesse de groupe v_g, avec $\xi_2^{'} = \xi_2 - v_g\tau_2$ et $\tau_2^{'} = \tau_2$, on peut simplifier cette équation pour aboutir à

$$-A_{\tau_2^{'}} + \frac{3iK}{2}A_{\xi_1\xi_1} + \frac{i}{3K}|A|^2A = 0 \quad . \tag{4.61}$$

Une simplification par i la met sous la forme habituelle d'une équation de NLS

$$iA_{\tau_2^{'}} + \frac{3K}{2}A_{\xi_1\xi_1} + \frac{1}{3K}|A|^2A = 0 \quad , \tag{4.62}$$

dont le produit des coefficients de la dérivée seconde et du terme non-linéaire (produit PQ dans la notation habituelle) est *positif*.

Ce résultat indique que des solitons-enveloppe peuvent se propager dans le plasma, et de plus, comme nous l'avions montré dans le chapitre 3 sur l'équation de NLS, il implique que l'onde plane acoustique est *instable* pour tous les petits vecteurs d'ondes et aura tendance à s'automoduler pour générer les solitons.

Le passage que nous avons réalisé, de l'équation de KdV à celle de NLS pour le plasma, ne sert pas seulement à obtenir une équation décrivant la réponse du plasma quand il est excité par une onde. Il a une signification physique plus profonde car il montre que les ondes planes sont instables dans le plasma et que *le calcul dans l'approximation linéaire donne un résultat qualitativement incorrect* puisqu'il conclut au contraire à la stabilité. Bien entendu, l'étude linéaire n'est pas totalement dépourvue de sens, puisque si l'on crée dans le plasma une onde dont l'amplitude est extrêmement faible, l'instabilité due aux phénomènes non-linéaires, qui est un effet du second ordre, mettra longtemps à se développer de manière perceptible et peut même passer inaperçue sur la durée limitée d'une expérience. Mais on doit néanmoins s'attendre à une instabilité à long terme, même pour des signaux très faibles, et cela montre que l'on ne peut pas se permettre de négliger les effets non-linéaires.

De plus, en pratique, ils ont une forte chance de jouer un rôle encore plus grand que celui que nous avons trouvé en faisant l'hypothèse que le plasma était excité par une onde plane (invariante par translation selon y et z), ce qui réduisait l'étude à un problème unidimensionnel. En général, l'onde excitatrice n'interagit pas avec la totalité du plasma dans sa dimension transversale (en particulier pour les plasmas atmosphériques !) et il faut faire l'étude à deux ou trois dimensions. Dans ce cas, on peut s'attendre à des phénomènes d'instabilité beaucoup plus violents, puisque nous avons vu, dans le chapitre

consacré à l'équation de NLS, qu'en dimension deux ou trois l'automodulation se poursuit jusqu'au « collapse », *i.e.* une concentration d'énergie infinie. Évidemment, en pratique, la densité d'énergie restera finie à cause d'effets non pris en compte dans notre calcul, comme par exemple la température ionique non nulle. Une perturbation arbitraire de l'état d'équilibre se compose en général d'ondes non planes ayant des vecteurs d'onde variés et chaque composante aura une tendance à l'autofocalisation induisant l'instabilité de l'état d'équilibre. C'est une situation bien connue dans les plasmas qui conduit à une réponse chaotique qui peut se traduire par un « bruit » intense sur des ondes radio qui s'y propagent.

4.6 Observations expérimentales

L'excitation des plasmas par des ondes modulées est un phénomène courant quand on cherche en particulier à y faire propager des signaux électromagnétiques. Pour observer le comportement du plasma dans un régime où il est décrit par l'équation de KdV, il faut, d'une part, utiliser des excitations plus intenses que dans le cas où l'on s'intéresse à sa réponse de type NLS (rappelons que nous sommes passés de l'équation de KdV à l'équation de NLS en cherchant une solution qui était d'ordre ε) et, d'autre part, utiliser des impulsions, qui sont qualitativement similaires aux solitons de l'équation de KdV, et non des ondes sinusoïdales. Des expériences de ce type ont été faites [74] en appliquant une forte impulsion de tension à une extrémité d'un dispositif confinant un plasma dans lequel le rapport entre températures électronique et ionique était de l'ordre de 30. Cette expérience respectait ainsi l'une des hypothèses essentielles du calcul présenté ci-dessus, sans laquelle on peut s'attendre à un amortissement trop fort de l'onde acoustique ionique. Les résultats ont confirmé les prédictions que l'on peut déduire de l'équation de KdV :

- une forte impulsion positive de tension, associée à une compression du plasma, tend d'abord à prendre un front de plus en plus raide sous l'effet de la non-linéarité, avant de se décomposer en plusieurs solitons qui se propagent à une vitesse supersonique. Leur amplitude est proportionnelle à l'excès de leur vitesse par rapport à la vitesse du son, comme l'indique la solution de l'équation de KdV ;
- au contraire, une impulsion négative de tension, associée à une diminution locale de la densité ionique, se disperse en un simple train d'ondes non localisées au cours de sa propagation.

Des expériences ont aussi été réalisées en envoyant une impulsion à chaque extrémité de la cavité contenant le plasma, de façon à observer la collision frontale de deux solitons se propageant dans des sens opposés. Cette configuration ne peut pas être traitée par la modélisation que nous avons présentée. En effet, quand on établit l'équation de KdV, on se place dans un repère mobile

à la vitesse du son, ce qui oblige à faire le choix d'un sens de propagation. Cette situation montre que *la modélisation doit être non seulement adaptée au système physique, le plasma, mais doit aussi tenir compte des conditions dans lesquelles on l'excite.* Nous l'avons déjà signalé à propos du choix entre une description de type KdV pour des excitations impulsionnelles ou NLS pour des perturbations sinusoïdales. On constate qu'il faut souvent tenir compte des conditions aux limites dès le développement du modèle et non pas seulement à la fin quand on a obtenu l'équation décrivant le système.

Une équation qui respecte l'invariance par changement de x en $-x$ par rapport au repère du laboratoire, contrairement à l'équation de KdV, a été obtenue par Makhankov en partant de la relation de dispersion linéaire [101]. En réécrivant la relation de dispersion (4.25) sous la forme $\omega^2(1+k^2)=k^2$, puis en cherchant les opérateurs différentiels qui conduisent à une telle relation de dispersion, comme nous l'avions indiqué dans le cas des fibres optiques (section 3.6.3), on obtient

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial t^2}\left(1-\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)-\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right]\phi=0 \quad . \tag{4.63}$$

On déduit ensuite une équation non-linéaire pour le plasma en ajoutant à l'équation (4.63) le terme non-linéaire $\partial\phi^2/\partial x$ rencontré dans l'équation de KdV. L'équation de type Boussinesq obtenue possède par construction un spectre linéaire correct. Ses solutions ne sont pas invariantes après collision puisque l'on note une faible perte d'énergie lorsque deux excitations interagissent mais les quasi-solitons sont néanmoins préservés, en accord avec les observations expérimentales [74].

La comparaison quantitative des résultats expérimentaux avec les prédictions de l'équation de KdV montre cependant que la modélisation que nous avons présentée n'est pas parfaite. Par exemple, si l'on représente l'excès de vitesse des solitons par rapport à la vitesse du son en fonction de leur amplitude, on obtient bien une droite comme le prédit l'équation de KdV mais sa pente est supérieure de 10 à 20 % à la prédiction de l'équation de KdV [147]. De nombreuses corrections à l'équation de KdV pour un plasma ont été proposées [147]. Elle conduisent à des équation KdV modifiées ayant un comportement qualitatif tout à fait analogue à celui de l'équation de KdV que nous avons obtenue, mais quantitativement meilleures. La correction primordiale provient de l'effet de la température ionique finie, qui introduit un terme de la forme $-3T_i/(T_e\, n_i)\times(\partial n_i/\partial x)$ dans l'équation du mouvement (4.9), dont le seul effet est de renormaliser le terme non-linéaire de l'équation de KdV. La dissipation ne peut pas non plus être ignorée. Elle a tendance non seulement à diminuer l'amplitude du soliton, mais crée également une « queue » derrière le soliton, dont l'amplitude croît progressivement au cours du temps. Quand on la prend en compte, on aboutit à une équation de type KdV avec une terme diffusif supplémentaire, qui représente bien le comportement expérimental. Enfin, nous nous sommes intéressés ici au cas d'un plasma à une

composante, mais on peut trouver des solitons dans des plasmas à plusieurs composantes, comme un plasma Ar–He. Il est remarquable de noter que, dans ce cas aussi, les perturbations acoustiques non-linéaires peuvent être décrites par une équation de KdV.

Il peut sembler judicieux d'établir l'équation la plus complète possible, tenant simultanément compte de tous les effets présents dans le plasma tels que la température ionique non nulle, la dissipation, l'aspect non isotherme des électrons dont la mobilité n'est évidemment pas infinie, ... Mais le « progrès » que l'on réalise ainsi est illusoire, d'une part, parce que l'on introduit alors de nombreux paramètres qui ne peuvent pas tous être déterminés *a priori*, et, d'autre part, parce que l'équation à laquelle on parvient ne peut plus être traitée analytiquement pour faire des prévisions générales sur le comportement du système. *La meilleure modélisation n'est pas nécessairement la plus exhaustive.* C'est plutôt celle qui sait s'adapter aux questions que l'on pose sur le système et aux capacités expérimentales. Nous avons déjà signalé à l'occasion de l'étude des lignes électriques qu'il peut être préférable d'utiliser une description de KdV qui apporte tout un arsenal de méthodes mathématiques, plutôt qu'une description par une équation de Boussinesq modifiée, théoriquement plus exacte, mais dont les prédictions ne diffèrent de celles de l'équation de KdV que par un écart de l'ordre de l'erreur expérimentale. Pourtant, si l'on veut décrire la collision de deux solitons se déplaçant en sens inverses, c'est l'équation de type de Boussinesq qu'il faut choisir.

4.7 Discussion

Dans la mesure où la modélisation peut amener à décrire un même système physique par des équations aussi différentes que les équations de KdV, NLS et de Boussinesq, on peut légitimement se demander si la description n'est pas seulement le fruit d'hypothèses *ad hoc*. Comme nous l'avons montré dans la section précédente, il y a du vrai dans une telle affirmation si, par « hypothèses *ad hoc* », on entend hypothèses adaptées à ce que l'on veut décrire, et nous espérons avoir démontré que cela peut être une approche tout à fait légitime et correcte. Bien entendu, bien que l'étude des différentes classes d'équations non-linéaires et de leur variantes fournisse toute une panoplie d'outils dans laquelle on peut puiser pour développer des modèles, les possibilités d'adapter la modélisation au problème sont limitées par des critères de validité bien précis. Par exemple, on peut observer que les études sur les plasmas ne nous ont pas amenés à introduire des équations de la famille sine-Gordon, c'est-à-dire des équations ayant des solutions de type soliton topologique. C'est tout simplement parce que, dans le cas du plasma, le système n'a qu'un seul état fondamental. Par ailleurs, pour le choix entre une description de KdV ou de NLS, outre la nature impulsionnelle ou ondulatoire de l'excitation, il faut aussi considérer son amplitude. La description de NLS est déduite de

l'équation de KdV en utilisant un développement perturbatif dont le terme le plus bas est d'ordre ε. Elle est donc adaptée au cas des amplitudes plus faibles que celles décrites par l'équation de KdV, et ce n'est pas un hasard si ses solutions ressemblent plus aux ondes de l'équation linéarisée que celles de l'équation de KdV. Elle constitue un intermédiaire entre la limite linéaire et la non-linéarité décrite par l'équation de KdV.

Pour obtenir des informations sur le comportement dominant dans un système physique indépendamment de l'excitation initiale appliquée, une démarche courante en physique consiste à travailler sur des modèles asymptotiques simplifiés valables dans des régimes particuliers. Nous en présentons ici succinctement deux exemples, en hydrodynamique et pour les lignes électriques.

4.7.1 Les ondes hydrodynamiques

Deux régimes des ondes hydrodynamiques peuvent être considérés :

– Dans le cas d'une couche de fluide de *profondeur faible*, conformément au résultat établi dans l'annexe A, on aboutit à l'équation de KdV étudiée dans le chapitre 1,

$$u_t + u_x + uu_x + u_{xxx} = 0 \quad . \tag{4.64}$$

Il s'avère qu'au même ordre d'approximation, on peut obtenir [25] l'équation de Benjamin-Bona-Mahony (BBM)

$$u_t + u_x + uu_x - u_{xxt} = 0 \quad . \tag{4.65}$$

Cette équation, moins connue, et donc moins utilisée que sa cousine (4.64), ne possède pas les propriétés mathématiques de celle-ci mais a néanmoins un bien meilleur comportement pour les excitations très localisées dont le spectre spatial comporte des composantes de courtes longueurs d'ondes, c'est-à-dire de grands vecteurs d'ondes, comme la figure 4.1 le met en évidence. On constate en effet sur la figure que, pour k grand, la relation de dispersion issue de l'équation de KdV peut amener ω à s'annuler pour un vecteur d'onde non nul, ce qui est associé à une instabilité, alors que celle que donne l'équation de BBM n'a pas ce comportement pathologique.

Par ailleurs, pour évaluer la limite de validité de l'équation de KdV, il est nécessaire d'étudier la stabilité de ses ondes solitaires vis-à-vis de perturbations transverses. Introduisons une longueur d'onde typique μ dans la direction transverse y, tout en restant dans le cadre des hypothèses de l'annexe A ayant permis d'aboutir à l'équation de KdV. En supposant que μ est grande par rapport à l'extension spatiale du soliton de KdV, on aboutit [78] à l'équation de Kadomtsev-Petviashvili (KP)

$$(u_t + u_x + uu_x + u_{xxx})_x = \pm u_{yy} \quad . \tag{4.66}$$

Cette équation de KP possède une grande famille de solutions quasi-périodiques exactes, chacune ayant plusieurs phases indépendantes. Des comparaisons récentes avec les expériences ont mis en évidence [67, 68] que la famille des solutions à deux phases permettait de décrire de façon étonnamment exacte des observations expérimentales sur les ondes en eau peu profonde lorsqu'elles développent des structures qui ne sont plus strictement unidimensionnelles. Les solutions plus sophistiquées avec un nombre plus grand de phases devraient permettre de décrire des phénomènes encore plus complexes.

– Dans le cas d'une *profondeur « infinie »*, au contraire, on peut obtenir une équation de NLS pour les ondes hydrodynamiques de la manière suivante :

on s'intéresse à l'évolution de l'enveloppe de la surface libre en supposant qu'elle varie lentement par rapport à l'espace et en fixant une variation maximale δk du nombre d'onde de l'enveloppe des oscillations de la surface par rapport au nombre d'onde k_0 de ces oscillations. Les hypothèses exactes sont :

1. $\varepsilon = A/L \ll 1$ où A est une amplitude et L une extension spatiale caractéristique comme précisé dans la figure de l'annexe A.
2. $\delta k/k_0 = \mathcal{O}(\varepsilon)$, ce qui correspond au régime où il peut y avoir équilibre entre l'effet non-linéaire et la dispersion de la modulation lentement variable.

Dans la limite où la profondeur h est telle que h/L tend vers l'infini, on obtient [43] l'équation de NLS. L'instabilité modulationnelle à laquelle elle conduit est connue en hydrodynamique sous le nom d'instabilité de Benjamin-Feir [24]. Bien qu'elle se produise en eau profonde, on peut percevoir ses effets jusqu'en bord de mer : si l'on observe les vagues qui arrivent sur une plage, on note presque toujours une modulation régulière de leur amplitude avec une période qui est généralement de 6 à 7 vagues.

4.7.2 Les lignes électriques

Les lignes électriques non-linéaires fournissent un cas intéressant où l'on peut mettre en évidence expérimentalement la coexistence de deux types de solitons dans le même système physique : des solitons « impulsion » et des « solitons-enveloppe ». Rappelons tout d'abord que nous avions établi que la ligne électrique introduite dans le chapitre 1, peut être décrite dans le cadre de l'approximation des milieux continus par l'équation

$$v_{tt} - c_0^2 v_{xx} - \frac{c_0^2}{12} v_{xxxx} - a(v^2)_{tt} = 0 \quad . \tag{4.67}$$

– Dans le chapitre 1, nous avons montré que cette équation de Boussinesq était une étape conduisant assez directement à une équation de KdV en choisissant de manière adéquate les échelles de temps, d'espace et d'amplitude.

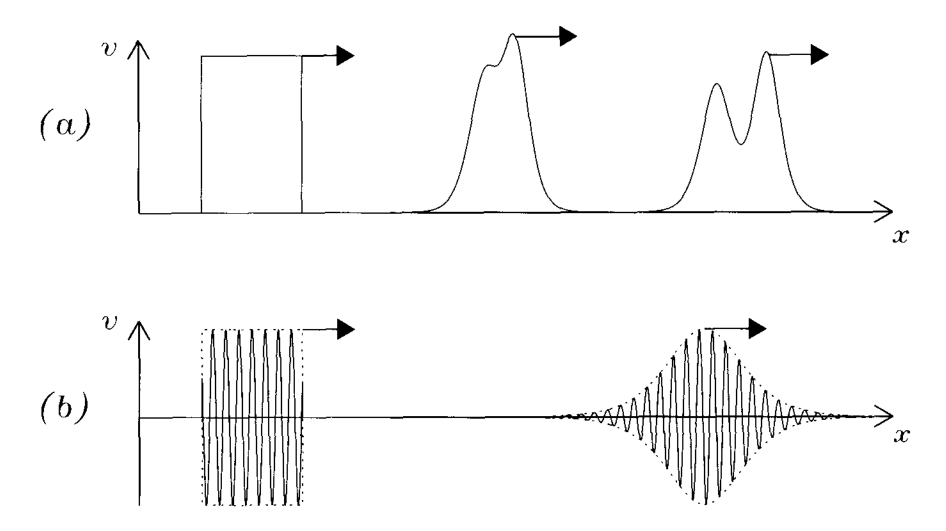


FIG. 4.2 – Figure schématique montrant le type de solutions obtenues dans la ligne électrique non-linéaire selon que la classe de la condition initiale est de type impulsion (a) ou enveloppe (b). Dans chaque cas, le signal à gauche est celui que l'on produit avec un générateur usuel, et (le ou) les signaux à droite représentent l'allure de la tension dans la ligne quand les solitons se sont formés et se sont séparés des composantes linéaires qui ont aussi été créées par le signal du générateur.

– Dans la limite des amplitudes faibles, où la différence de potentiel v est d'ordre ε mais suffisante pour exciter les non-linéarités, cette équation se réduit (cf. chap. 3) à une équation de NLS avec $PQ > 0$. Cette condition assure l'existence de solitons que l'on peut observer expérimentalement [9].

Dans ce système, on prévoit donc l'existence possible de deux types de solitons qui peuvent exister pour des amplitudes d'excitation similaires. La création d'un type ou de l'autre n'est déterminée que par la nature du signal électrique appliqué à l'extrémité de la ligne, comme schématisé sur la figure 4.2. Avec deux générateurs différents aux deux extrémités de la ligne, on peut donc produire une collision frontale entre un soliton impulsion et un soliton enveloppe. Les expériences montrent que, dans la limite de la précision de mesure, ces deux types de solitons se croisent sans se détruire et pratiquement sans perdre d'énergie.

Ce n'est pas vraiment surprenant car c'est une caractéristique très générale des systèmes non-linéaires de ne *pas avoir une solution unique*, et c'est ce qui fait toute leur richesse. Mais, en même temps, cela pose un problème que la modélisation n'a pas encore résolu. On sait obtenir une équation adaptée à chaque type de solution, effectivement satisfaisante pour le type qu'elle décrit quand on la compare aux expériences dans lesquelles on ne génère

qu'un seul type de soliton. Mais aucune de ces équations n'est adaptée à décrire l'autre type. L'équation non-linéaire « universelle » pour analyser les expériences d'interaction entre un soliton enveloppe et un soliton impulsion reste encore à établir.

Deuxième partie

Méthodes mathématiques d'étude des solitons

Avant-propos

LES ÉQUATIONS À SOLITONS sont intéressantes pour leurs propriétés mathématiques car elles décrivent des systèmes à nombre infini de degrés de liberté, totalement intégrables, pour lesquels il existe des méthodes d'étude très élégantes, comme la méthode d'inversion des données de diffusion que nous allons présenter dans cette partie. Pour un physicien, cependant, les solitons pourraient paraître plutôt « ennuyeux » puisqu'une fois créés ils survivent indéfiniment en subissant seulement des changements de phase lors des collisions.

En fait, les applications physiques montrent que les choses ne sont évidemment pas aussi simples : les systèmes obéissant à des équations de champs non-linéaires ne sont qu'approximativement décrits par les équations des systèmes intégrables à solitons. Les solutions solitons ne représentent donc leurs propriétés physiques que localement et pour une durée limitée. Elles ne constituent qu'une première approximation.

Des phénomènes négligés pour établir les équations à solitons comme :

- les termes d'ordre supérieur dans l'équation,
- la dissipation,
- une faible variation des paramètres dans l'espace ou le temps,
- les effets du réseau discret pour les applications en physique du solide notamment, etc.,

interviennent, modifiant les caractéristiques des solitons sur des temps longs, ou de grandes distances.

On peut étudier tous ces effets par des théories de perturbation autour de la solution soliton ou par des méthodes de coordonnées collectives qui reviennent à traiter le soliton comme un « objet » dont on étudie la dynamique. C'est ce que nous ferons dans les deux premiers chapitres de cette partie.

Il existe également un autre problème intéressant d'un point de vue physique, celui de l'évolution d'une condition initiale quelconque. On a vu qu'elle allait généralement produire des solitons, mais on peut se demander combien et quelles seront leurs caractéristiques, etc. L'approche qui permet de répondre à cette question est la « méthode d'inversion des données de diffusion » (inverse scattering) que nous décrirons dans le chapitre 7. Nous verrons enfin que cette méthode, qui s'applique à des systèmes totalement intégrables, peut aussi servir de point de départ pour une théorie perturbative.

Chapitre 5

Linéarisation autour de la solution soliton

La toute première approche à laquelle on pense quand on veut étudier l'effet d'une perturbation sur un soliton est d'utiliser la théorie de la réponse linéaire, c'est-à-dire de linéariser autour de la solution soliton. Cette méthode est donc équivalente à une étude de stabilité linéaire du soliton. Elle ne signifie cependant pas que l'on ignore l'aspect non-linéaire du problème puisqu'on *linéarise* autour de la solution *non-linéaire*.

5.1 Spectre des excitations d'un soliton sine-Gordon

Considérons, par exemple, l'équation de SG

$$\theta_{tt} - c_0^2\,\theta_{xx} + \omega_0^2 \sin\theta = 0 \quad , \tag{5.1}$$

dont on a déjà identifié la solution soliton

$$\theta^{(S)} = 4 \arctan \exp\left[\pm \frac{\omega_0}{c_0} \frac{(x - vt)}{\sqrt{1 - v^2/c_0^2}}\right] \quad , \tag{5.2}$$

ainsi que les solutions en ondes planes $\theta = A \exp i(kx - \omega t)$ dont la relation de dispersion est $\omega^2 = \omega_0^2 + c_0^2 k^2$.

Intéressons-nous maintenant aux petites excitations *autour de la solution soliton* en cherchant des solutions de la forme

$$\theta(x,t) = \theta^{(S)}(x,t) + \psi(x,t) \qquad \text{avec} \qquad |\psi(x,t)| \ll 1 \quad . \tag{5.3}$$

Comme l'équation SG est invariante par transformation de Lorentz, on peut se placer dans le repère propre du soliton, c'est-à-dire imposer à la vitesse v

d'être nulle, la solution $\theta^{(S)}$ devenant indépendante du temps. En reportant dans l'équation (5.1), on obtient

$$\psi_{tt} - c_0^2 \left(\theta_{xx}^{(S)} + \psi_{xx}\right) + \omega_0^2 \left(\sin\theta^{(S)} + \psi\cos\theta^{(S)}\right) = 0 \quad , \tag{5.4}$$

en se limitant aux termes linéaires pour la perturbation ψ. L'équation se simplifie fortement en utilisant le fait que $\theta^{(S)}$ est solution de l'équation (5.1), et il ne reste que

$$\psi_{tt} - c_0^2\,\psi_{xx} + \omega_0^2 \cos\theta^{(S)}\ \ \psi = 0 \quad . \tag{5.5}$$

En notant que

$$1 - \cos\theta^{(S)} = 2\sin^2(\theta^{(S)}/2) = 2\big[2\tan(\theta^{(S)}/4)/(1+\tan^2(\theta^{(S)}/4))\big]^2 \tag{5.6}$$

$$= 2\,\mathrm{sech}^2(\omega_0 x/c_0) \quad , \tag{5.7}$$

et en cherchant des solutions sous la forme

$$\psi(x,t) = f(x)\,e^{-i\omega t} \quad , \tag{5.8}$$

on obtient l'équation suivante pour la fonction f

$$-c_0^2\,\frac{\mathrm{d}^2 f}{\mathrm{d}x^2} + \omega_0^2\left(1 - 2\,\mathrm{sech}^2\,\frac{\omega_0 x}{c_0}\right) f(x) = \omega^2 f(x) \quad , \tag{5.9}$$

c'est-à-dire une équation formellement analogue à l'équation de Schrödinger indépendante du temps, qui décrit l'état quantique d'une particule dans le potentiel

$$V(x) = \omega_0^2\left(1 - 2\,\mathrm{sech}^2(\omega_0 x/c_0)\right) \quad . \tag{5.10}$$

Le soliton se comporte donc comme un puits de potentiel pour les ondes linéaires, et l'on notera que l'équation et le potentiel sont les mêmes pour un soliton ou un antisoliton.

Si l'on se souvient qu'une chaîne de pendules couplés par un ressort de torsion est décrite par l'équation de SG, on remarque que ce dispositif mécanique simple permet d'illustrer expérimentalement aussi bien la « Relativité restreinte », en révélant notamment la contraction de Lorentz, que la « Mécanique quantique » en montrant la diffusion d'un paquet d'ondes par un puits de potentiel !

Le potentiel $V(x)$ est l'un des rares potentiels dont on puisse déterminer le spectre de manière analytique. C'est un problème classique de mécanique quantique [89, 111] qui conduit aux résultats suivants :

- Il n'existe qu'un seul état lié correspondant à la valeur propre $\omega_b^2 = 0$ et à la fonction propre localisée

$$f_b(x) = (2\omega_0/c_0)\,\mathrm{sech}(\omega_0 x/c_0) \quad . \tag{5.11}$$

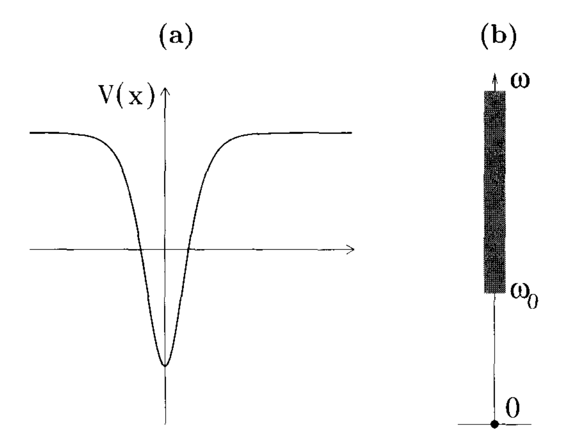


FIG. 5.1 – (a) Allure du potentiel $V(x) = \omega_0^2\left(1 - 2\,\mathrm{sech}^2\,\frac{\omega_0 x}{c_0}\right)$. (b) Représentation schématique du spectre des petites excitations autour du soliton sine-Gordon. Le point à $\omega = 0$ est la fréquence ω_b associée à la présence du soliton.

Il s'agit de l'état lié de plus basse valeur propre d'une équation de Schrödinger à une dimension. On sait que sa fonction propre ne doit pas avoir de racines et c'est bien ce que confirme la solution.

– Les fonctions propres du continuum, associées aux valeurs propres $\omega_k^2 = \omega_0^2 + c_0^2 k^2$, s'écrivent

$$f_k(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\frac{c_0}{\omega_k}e^{ikx}\left(k + i\frac{\omega_0}{c_0}\tanh\frac{\omega_0 x}{c_0}\right) \tag{5.12}$$

et sont telles que $\lim_{x\to\pm\infty} f_k(x) = (1/\sqrt{2\pi})\exp[i(kx \pm \phi_0)]$ où $\phi_0 = \arctan(\omega_0/c_0 k)$.

Les fonctions propres du continuum sont donc, à grande distance, comparables à des ondes planes ; c'est un résultat que l'on pouvait prévoir puisque, dans ces régions, la solution soliton est pratiquement constante et égale à une valeur correspondant à un minimum du potentiel sinusoïdal apparaissant dans l'énergie du système décrit par l'équation de SG. C'est pourquoi, à grande distance du cœur du soliton, les solutions de l'équation (5.5) correspondent aux ondes planes déjà déterminées comme solution de l'équation de SG linéarisée autour d'un état d'équilibre. Pour ces ondes planes, la traversée du soliton se traduit uniquement par un déphasage de $2\phi_0$: le potentiel est dit *non réfléchissant*. C'est une caractéristique des potentiels associés aux systèmes intégrables, mais ce n'est cependant pas une condition suffisante d'intégrabilité car les ondes solitaires de certains systèmes non intégrables (tel que le modèle ϕ^4) créent aussi des potentiels non réfléchissants pour les ondes linéaires.

On notera sur le spectre représenté sur la figure 5.1(b) que, par rapport au spectre que l'on obtient en l'absence du soliton qui ne comprend que les fréquences $\omega \geq \omega_0$, la présence du soliton est responsable de l'apparition d'une fréquence supplémentaire $\omega_b = 0$. En réalité, comme le système doit avoir autant de modes que de degrés de liberté, et que la présence du soliton n'ajoute pas de degré de liberté, ce mode doit forcément provenir d'un mode du continuum qui a changé de pulsation à cause du soliton. La forme en cloche de sa fonction propre montre qu'il s'agit en fait de l'ancien mode du bas du continuum (mode $k = 0$ en l'absence du soliton) qui a été localisé spatialement par la présence du soliton. Les autres modes possèdent la même relation de dispersion qu'en l'absence de soliton, mais leur fonction propre est fortement modifiée dans le voisinage du centre du soliton.

Le mode de pulsation nulle est important pour les théories des perturbations du soliton car il est associé à son invariance par translation. En effet, puisque l'équation de SG est invariante par toute translation selon x, la solution $\theta^{(S)}(x-a)$ est solution de cette équation quelle que soit la valeur de a et elle a la même énergie que la solution initiale $\theta^{(S)}(x)$. Ainsi, bien que la solution soliton corresponde à un extremum de l'hamiltonien, elle ne correspond pas à un minimum mais elle est dans une situation de *stabilité marginale* par rapport à une translation. Si l'on effectue une petite translation du soliton, la variation de la solution est donnée par

$$\Delta\theta^{(S)}(x) = \theta^{(S)}(x-\delta a) - \theta^{(S)}(x) \simeq -\delta a \frac{\partial \theta^{(S)}}{\partial x} = -\delta a \, 2\frac{\omega_0}{c_0} \operatorname{sech}\left(\frac{\omega_0 x}{c_0}\right) \tag{5.13}$$

qui est proportionnelle à la fonction propre $f_b(x)$, donnée par l'équation (5.11). Le coefficient de proportionnalité donne la valeur de la translation qui a été effectuée. Le mode de fréquence nulle est bien le mode de translation du soliton. C'est le mode de valeur propre nulle, appelé mode de Goldstone, qui apparaît dans toutes les théories de champ invariantes par translation.

5.2 Application à l'étude des perturbations du soliton

5.2.1 Présentation

Les fonctions $f_b(x)$ et $f_k(x)$, solutions de l'équation de Schrödinger (5.9) sont fonctions propres de l'opérateur spatial hermitique

$$D = -c_0^2 \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + \omega_0^2 \left(1 - 2\operatorname{sech}^2 \frac{\omega_0 x}{c_0}\right) \quad . \tag{5.14}$$

Comme on le montre en mécanique quantique, elles constituent une base orthogonale dans l'espace des fonctions qui décrivent les petites déviations par rapport à la solution soliton.

Comme la fonction f_b est réelle, les relations d'orthogonalité s'écrivent

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}x\, f_b(x) f_b(x) = \frac{8\omega_0}{c_0} \tag{5.15}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}x\, f_k^*(x) f_{k'}(x) = \delta(k-k') \tag{5.16}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}x\, f_k(x) f_b(x) = 0 \quad , \tag{5.17}$$

alors que la relation de fermeture de la base s'écrit

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}k\, f_k^*(x) f_k(x') + \frac{c_0}{8\omega_0} f_b(x) f_b(x') = \delta(x-x') \quad . \tag{5.18}$$

On note que la fonction $f_b(x)$ n'est pas normée : son coefficient est choisi pour qu'elle corresponde exactement à la dérivée de la solution soliton (mode de Goldstone).

Cette base est très pratique pour étudier l'évolution des solitons sine-Gordon sous l'effet de diverses perturbations [57] puisqu'elle permet de donner une interprétation directe des résultats :
- le coefficient de la fonction propre $f_b(x)$ est égal à l'opposé du déplacement du soliton sous l'effet de la perturbation (selon l'expression (5.13)) ;
- les contributions du continuum, en $f_k(x)$, correspondent aux déformations du soliton.

5.2.2 Exemple : réponse du soliton à une force extérieure en présence de dissipation

Considérons l'équation de SG perturbée suivante :

$$\theta_{tt} - c_0^2 \theta_{xx} + \omega_0^2 \sin\theta + \Lambda\theta_t = E \quad , \tag{5.19}$$

qui est de la même forme que l'équation que nous avions obtenue pour une jonction Josephson longue (cf. chap. 2), c'est-à-dire une équation de SG forcée par un terme constant et comportant un terme d'amortissement.

Les calculs étant plus simples après élimination des constantes, nous introduisons les variables sans dimension suivantes :

$$t' = \omega_0 t, \quad x' = \frac{\omega_0}{c_0} x \quad \text{et nous posons} \quad \Gamma = \frac{\Lambda}{\omega_0}, \quad \chi = \frac{E}{\omega_0^2} \quad . \tag{5.20}$$

L'équation se réduit à

$$\theta_{t't'} - \theta_{x'x'} + \sin\theta + \Gamma\theta_{t'} = \chi \quad . \tag{5.21}$$

On se propose de déterminer ce que devient une solution soliton mobile à la vitesse β en présence du forçage et de l'amortissement. Si on suppose que le

forçage est faible ($\chi \ll 1$), on peut chercher la solution sous la forme d'une solution soliton perturbée

$$\theta(x', t') = \theta^{(S)}(x', t') + \psi(x', t') \quad . \tag{5.22}$$

Pour profiter de notre connaissance de la base des fonctions décrivant les petites déviations autour d'un soliton statique, il est intéressant d'effectuer une transformation de Lorentz pour se placer dans le repère propre du soliton. Introduisons donc les variables

$$\xi = \gamma(x' - \beta t'), \quad \tau = \gamma(t' - \beta x') \quad \text{où} \quad \gamma = 1/\sqrt{1-\beta^2} \quad . \tag{5.23}$$

L'équation (5.21) conduit à

$$\theta_{\tau\tau} - \theta_{\xi\xi} + \sin\theta + \Gamma\gamma\,(\theta_\tau - \beta\theta_\xi) = \chi \quad . \tag{5.24}$$

En reportant l'ansatz (5.22) dans cette équation, et en utilisant comme précédemment le fait que $\theta^{(S)}$ est solution de l'équation de SG, on obtient

$$\psi_{\tau\tau} - \psi_{\xi\xi} + (1 - 2\,\mathrm{sech}^2\,\xi)\psi + \gamma\Gamma\psi_\tau - \beta\gamma\Gamma\psi_\xi = \chi + 2\beta\gamma\Gamma\,\mathrm{sech}\,\xi \quad , \tag{5.25}$$

en se limitant aux termes linéaires en ψ et en utilisant l'identité $\theta_\xi = \psi_\xi + 2\,\mathrm{sech}\,\xi$.

Pour résoudre cette équation, nous allons développer la fonction ψ sur la base de fonctions (f_b, f_k) définie précédemment (pour passer aux variables adimensionnées, il suffit de poser $\omega_0 = c_0 = 1$ dans les expressions précédentes). On obtient donc

$$\psi(\xi, \tau) = \frac{1}{8}\phi_b(\tau) f_b(\xi) + \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}k\ \phi_k(\tau) f_k(\xi) \quad . \tag{5.26}$$

Comme on développe la fonction $\psi(\xi, \tau)$ à τ fixé, les coefficients sur la base des fonctions d'espace $f(\xi)$ dépendent de la variable τ. Le facteur $1/8$ est introduit pour que la fonction $\phi_b(\tau)$ garde sa signification habituelle, $\phi_b(\tau) = \int \mathrm{d}\xi\ f_b(\xi)\psi(\xi, \tau)$, compte tenu du fait que la fonction f_b n'est pas normée.

Reportons ce développement (5.26) dans l'équation (5.25) et projetons sur les différentes fonctions propres de manière successive. La projection sur f_b, c'est-à-dire le produit par f_b suivi d'une intégration sur ξ, va nous permettre de décrire la translation du soliton. Le terme en $\psi_{\tau\tau}$ donne simplement

$$\begin{aligned}\int \mathrm{d}\xi\ \psi_{\tau\tau}(\xi, \tau) f_b(\xi) &= \frac{1}{8}\,\phi_{b,\tau\tau}(\tau) \int \mathrm{d}\xi f_b(\xi) f_b(\xi) + \int \mathrm{d}k\ \phi_{k,\tau\tau}(\tau) \int \mathrm{d}\xi\ f_b(\xi) f_k(\xi) \\ &= \frac{1}{8}\,\phi_{b,\tau\tau}\end{aligned} \tag{5.27}$$

en tenant compte des relations d'orthogonalité de la base.
Le terme en $\psi_{\xi\xi}$ donne

$$\int \mathrm{d}\xi\ \psi_{\xi\xi}(\xi, \tau) f_b(\xi) = \frac{1}{8}\phi_b(\tau) \int \mathrm{d}\xi f_b(\xi) f_{b,\xi\xi}(\xi) + \int \mathrm{d}k\ \phi_k(\tau) \int \mathrm{d}\xi\ f_b(\xi) f_{k,\xi\xi}(\xi).$$

Mais, compte tenu de l'équation (5.9) vérifiée par les fonctions f, la combinaison de cette expression avec le terme $(1-2\,\mathrm{sech}^2\,\xi)\psi$ donne simplement

$$\frac{1}{8}\phi_b(\tau)\omega_b^2\int \mathrm{d}\xi\; f_b(\xi)f_b(\xi)+\int \mathrm{d}k\;\phi_k(\tau)\;\omega_k^2\int \mathrm{d}\xi\; f_b(\xi)f_k(\xi) \qquad (5.28)$$

qui est nulle puisque $\omega_b = 0$ et que la relation d'orthogonalité annule le second terme.

La contribution du terme en ψ_τ est simple car il ne subsiste que $\gamma\Gamma\phi_{b,\tau}$, en tenant compte des relations d'orthogonalité.

Le terme suivant en ψ_ξ nécessite un calcul plus explicite de la projection des dérivées f_ξ sur f_b. On obtient, d'une part,

$$\int \mathrm{d}\xi\; f_b(\xi)\frac{\mathrm{d}f_b}{\mathrm{d}\xi} = 4\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}\xi\;\;\mathrm{sech}\,\xi\times(-\,\mathrm{sech}\,\xi\tanh\xi)=0 \qquad (5.29)$$

et, d'autre part, en utilisant

$$\frac{\mathrm{d}f_k}{\mathrm{d}\xi} = \frac{ik}{\sqrt{2\pi}\omega_k}e^{ik\xi}(k+i\tanh\xi)+\frac{e^{ik\xi}}{\sqrt{2\pi}\omega_k}(i\,\mathrm{sech}^2\,\xi) \qquad (5.30)$$

$$= ikf_k(\xi)+\frac{ie^{ik\xi}}{\sqrt{2\pi}\omega_k}\,\mathrm{sech}^2\,\xi \quad , \qquad (5.31)$$

la projection $\int \mathrm{d}\xi\; f_b(\mathrm{d}f_k/\mathrm{d}\xi)$ donnera un premier terme nul puisqu'il est proportionnel à f_k (orthogonalité) alors que le second terme donne

$$\int \mathrm{d}\xi\; f_b\frac{\mathrm{d}f_k}{\mathrm{d}\xi} = ik\underbrace{\int \mathrm{d}\xi\; f_bf_k}_{=0}+\frac{2i}{\sqrt{2\pi}\omega_k}\underbrace{\int \mathrm{d}\xi\; e^{ik\xi}\,\mathrm{sech}^3\,\xi}_{\widetilde{F}(k)} \qquad (5.32)$$

en introduisant $\widetilde{F}(k)$, la transformée de Fourier de la fonction $\mathrm{sech}^3\,\xi$.

Enfin le membre de droite de l'équation (5.25) conduit à

$$\chi\int \mathrm{d}\xi\; f_b(\xi) = 2\chi\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}\xi\;\;\mathrm{sech}\,\xi = 2\pi\chi \qquad (5.33)$$

$$\text{et}\qquad \int \mathrm{d}\xi\; f_b(\xi)\,\mathrm{sech}\,\xi = 2\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}\xi\;\;\mathrm{sech}^2\,\xi = 4 \quad . \qquad (5.34)$$

Ce qui donne finalement pour la projection de l'équation (5.25) sur la fonction $f_b(\xi)$

$$\frac{\mathrm{d}^2\phi_b(\tau)}{\mathrm{d}\tau^2}+\gamma\Gamma\frac{\mathrm{d}\phi_b(\tau)}{\mathrm{d}\tau} = 2\pi\chi+8\beta\gamma\Gamma+\frac{2i\beta\gamma\Gamma}{\sqrt{2\pi}}\int \mathrm{d}k\;\frac{\widetilde{F}(k)}{\omega_k}\phi_k(\tau) \quad . \qquad (5.35)$$

De même, en projetant sur les fonctions propres du continuum, on obtient une équation pour $\phi_k(\tau)$ qui fait intervenir $\phi_b(\tau)$. On aboutit donc à un système d'équations couplées en $\phi_b(\tau)$ et $\phi_k(\tau)$ dont la résolution directe n'est pas possible. On peut cependant obtenir une solution approchée pour la perturbation du soliton en procédant en deux étapes :

(i) Dans un premier temps, on néglige la contribution du continuum dans l'équation en $\phi_b(\tau)$, ce qui revient à étudier la réponse du soliton *sans tenir compte de sa déformation.*

(ii) Dans un second temps, connaissant $\phi_b(\tau)$, on calcule $\phi_k(\tau)$, c'est-à-dire la déformation du soliton. On peut ensuite en déduire une correction à $\phi_b(\tau)$ en revenant à l'équation (5.35) et en y introduisant les valeurs de $\phi_k(\tau)$ que l'on vient d'obtenir. Cela revient à affiner la solution par un processus itératif.

L'étape (i) consiste donc à résoudre l'équation

$$\frac{\mathrm{d}^2\phi_b(\tau)}{\mathrm{d}\tau^2} + \gamma\Gamma\frac{\mathrm{d}\phi_b(\tau)}{\mathrm{d}\tau} = 2\pi\chi + 8\beta\gamma\Gamma \tag{5.36}$$

dont la solution est

$$\phi_b(\tau) = \left(8\beta + \frac{2\pi\chi}{\gamma\Gamma}\right)\left[\tau + \frac{e^{-\gamma\Gamma\tau} - 1}{\gamma\Gamma}\right] \quad . \tag{5.37}$$

Puisque la fonction $f_b(\xi)$ correspond au mode de translation du soliton et que nous avons vu que son préfacteur dans l'équation (5.26), $\phi_b(\tau)/8$, était égal à *l'opposé du déplacement du soliton*, ce déplacement causé par le terme χ en présence d'amortissement est

$$d = -\beta\left(1 + \frac{\pi\chi}{4\gamma\Gamma}\right)\left[\tau + \frac{e^{-\gamma\Gamma\tau} - 1}{\gamma\Gamma}\right] \quad . \tag{5.38}$$

Cette expression met en évidence qu'après une phase transitoire, le soliton atteint, pour des temps $\tau \gg 1/\gamma\Gamma$, une vitesse d'équilibre β^e qui vaut

$$\beta^e = -\beta\left(1 + \frac{\pi\chi}{4\beta\gamma\Gamma}\right) \tag{5.39}$$

dans le repère mobile à la vitesse β. Ce résultat est cohérent avec le fait qu'en l'absence de forçage extérieur ($\chi = 0$), mais en présence d'amortissement, on obtiendra un soliton au repos dans le référentiel du laboratoire ($\beta^e = -\beta$). En considérant la limite où il n'y aurait pas d'amortissement ($\Gamma \to 0$), on obtient bien une vitesse qui diverge en accord avec le fait qu'il n'y aura pas d'équilibre stable.

Si l'on revient aux cas dissipatifs ($\Gamma \neq 0$) et forcés ($\chi > 0$), on peut remarquer que le soliton est ralenti, conformément à ce que suggère la figure 5.2 qui montre qu'un terme χ positif, qui tend à augmenter la valeur de θ, déplace la position du soliton dans le sens négatif.

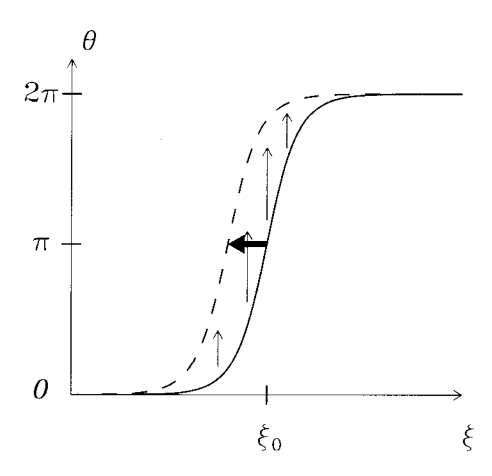


FIG. 5.2 – Déplacement négatif d'un soliton sine-Gordon sous l'effet d'un forçage uniforme $\chi > 0$.

Les calculs de l'étape (ii) devenant vraiment fastidieux, nous ne les présenterons pas ici mais le lecteur intéressé pourra les trouver dans la référence [57]. Le résultat essentiel est une dissymétrisation du soliton sous l'effet du forçage ainsi qu'un léger changement de la valeur θ, même loin du soliton, correspondant tout simplement au décalage de la position d'équilibre du système sous l'effet du forçage extérieur.

L'existence de cette déformation des ailes du soliton a donné naissance à une polémique sur les propriétés du soliton en tant que quasi-particule newtonienne. En effet, lorsque l'on applique la force, le soliton réagit tout d'abord par une déformation d'ensemble pratiquement sans se déplacer, avant de se mettre en mouvement seulement dans un second temps. La première étape, contradictoire avec un hypothétique comportement de quasi-particule, illustre un aspect important de la dynamique des solitons : bien que leurs propriétés de stabilité et de résistance lors des collisions fassent penser indubitablement à des particules, il faut plutôt avoir à l'esprit des particules *déformables*. Comme nous le verrons en particulier dans le cas du modèle ϕ^4, l'existence de cette possibilité de déformation peut modifier profondément la dynamique du soliton.

L'expression (5.37) met cependant en évidence *les limites de la méthode perturbative* utilisée puisque la fonction $\phi_b(\tau)$ croît linéairement avec la variable τ. Pour des temps longs, $\phi_b(\tau)$ ne peut plus être considéré comme une perturbation. Le résultat que nous avons obtenu n'est donc valable que pour décrire la mise en mouvement du soliton, donc pour des temps courts. Au-delà, on devra recourir à des méthodes différentes, comme la méthode des coordonnées collectives que nous verrons au chapitre suivant.

La méthode présentée ici est cependant intéressante car elle tient compte des déformations du soliton. Elle est particulièrement bien adaptée pour étudier l'interaction du soliton avec une perturbation localisée, qui ne conduira pas à une croissance indéfinie de la perturbation.

▷ *Pour approfondir* : On considère l'interaction d'un soliton sine-Gordon avec un potentiel perturbateur $g(x)$ décrite par l'hamiltonien

$$H = \int \mathrm{d}x \left[\frac{1}{2}\theta_t^2 + \frac{c_0^2}{2}\theta_x^2 + \omega_0^2(1 - \cos\theta) - \lambda g(x)\,\theta_x \right] \quad . \tag{5.40}$$

On considérera le cas où $g(x) = Y(x - x_0) - Y(x + x_0)$, où $Y(x)$ correspond à la fonction échelon de Heaviside :

1. écrire l'équation du mouvement ;
2. en développant la perturbation du soliton sur la base $(f_b(x), f_k(x))$, écrire l'équation vérifiée par le coefficient de $f_b(x)$;
3. par intégration de l'équation donnant le coefficient de f_b, montrer que le soliton ne subit qu'un déphasage à la traversée du potentiel perturbateur et étudier qualitativement la variation de vitesse pour un soliton ou un anti-soliton au niveau du défaut. On notera qu'il n'est pas nécessaire d'obtenir une expression explicite de toutes les intégrales intervenant dans le calcul pour faire cette étude.

La solution peut être trouvée dans la référence [57].

5.3 Spectre des excitations d'un soliton ϕ^4

L'étude du modèle ϕ^4 décrit par l'hamiltonien

$$H = \int \mathrm{d}x \left[\frac{1}{2}\phi_t^2 + \frac{1}{2}\phi_x^2 + \frac{1}{4}(\phi^2 - 1)^2 \right] \tag{5.41}$$

se fait comme celle du modèle sine-Gordon. Les résultats présentent cependant une différence qualitative aux conséquences importantes.

Lorsque l'on reporte l'ansatz $\phi = \phi_S(x) + \psi(x,t)$ dans l'équation du mouvement correspondante, on obtient l'équation linéarisée en ψ suivante :

$$\psi_{tt} - \psi_{xx} + \left(2 - 3\,\mathrm{sech}^2 \frac{x}{\sqrt{2}} \right) \psi = 0 \quad , \tag{5.42}$$

en utilisant bien sûr l'expression de la solution soliton $\phi_S = \tanh(x/\sqrt{2})$.

En cherchant, comme dans le cas sine-Gordon, une solution de la forme $\psi(x,t) = e^{-i\omega t} f(x)$, on obtient l'équation de Schrödinger suivante :

$$-f_{xx} + \left(2 - 3\,\mathrm{sech}^2 \frac{x}{\sqrt{2}} \right) f(x) = \omega^2 f(x) \quad . \tag{5.43}$$

Il est remarquable de noter que la forme du potentiel obtenu dans le cas sine-Gordon était identique, mais qu'ici le rapport de la profondeur sur la largeur est plus grand et permet l'existence de deux états liés [89, 111].

Outre les états délocalisés du continuum qui commencent à $\omega_c^2 = 2$, on trouve toujours l'état lié $\omega = 0$, correspondant au mode de translation

$$f_b(x) = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left(\tanh\frac{x}{\sqrt{2}}\right) = \frac{1}{\sqrt{2}}\,\mathrm{sech}^2\,\frac{x}{\sqrt{2}} \quad . \tag{5.44}$$



FIG. 5.3 – Spectre des excitations du soliton ϕ^4 et allure du premier état excité $f_1(x)$.

Il existe cependant un deuxième état lié correspondant à $\omega_1^2 = 3/2$, associé à la fonction propre

$$f_1(x) = \frac{1}{2^{3/4}}\tanh\frac{x}{\sqrt{2}}\,\mathrm{sech}\,\frac{x}{\sqrt{2}} \quad , \tag{5.45}$$

qui correspond à un *mode localisé de déformation du soliton* sans translation puisque le centre n'est pas affecté par ce mode impair ($\int \mathrm{d}x f_1(x) = 0$). Ce mode, representé sur la figure 5.3, correspond en réalité à une oscillation de la pente du soliton à la pulsation ω_1.

Par conséquent, contrairement au cas de sine-Gordon où les excitations possibles du soliton correspondent à une translation ou à un mode délocalisé du continuum, le soliton ϕ^4 peut réagir par une excitation de son *mode interne* : on peut donc le considérer comme une quasi-particule possédant un mode d'excitation qui lui est propre. Ce mode peut stocker de l'énergie, qui sera déplacée par le soliton puisque c'est un mode localisé autour du soliton. Ne faisant pas partie de l'énergie cinétique de translation, il peut donc modifier profondément la dynamique du soliton.

Son existence est, par exemple, perceptible lorsque le soliton est perturbé par un potentiel spatialement périodique. En effet, si le soliton se déplace à vitesse v par rapport à ce potentiel de période spatiale ℓ, il perçoit une perturbation dépendante du temps, de période $T = \ell/v$. Lorsque T coïncide avec $T_1 = 2\pi/\omega_1$, il y a résonance avec le mode interne et une partie de l'énergie cinétique du soliton y est transférée. Ce phénomène est ainsi responsable d'un

mécanisme de sélection de vitesse pour le soliton [54]. Mais les effets de l'excitation du mode interne sont encore beaucoup plus spectaculaires lorsque l'on étudie les collisions soliton-antisoliton dans le modèle ϕ^4 [34].

Comme nous l'avons déjà indiqué dans la section (2.4), dans le cas du modèle ϕ^4, l'emploi du terme « soliton » pour les solutions (souvent appelées « kinks ») est abusif : ce ne sont pas des solitons exacts et leur énergie n'est pas rigoureusement préservée lors des collisions. Les collisions excitent en particulier le mode interne des solitons et l'énergie qui y est stockée est empruntée à l'énergie cinétique des solitons qui émergent de la collision avec une vitesse finale v_f, inférieure à leur vitesse initiale v_i comme le met très bien en évidence la figure 5.4.

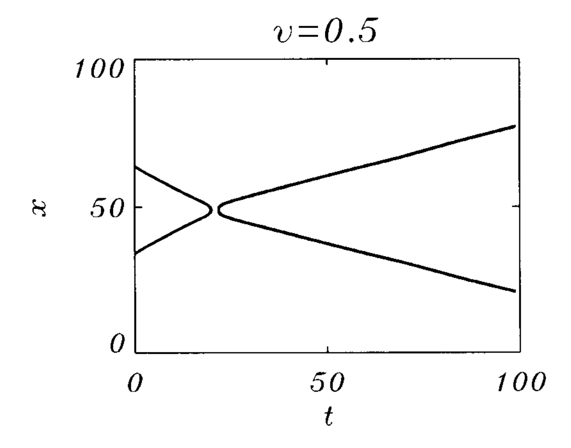


FIG. 5.4 – Collision d'un kink et d'un anti-kink dans le modèle ϕ^4 avec une *grande* vitesse initiale v_i. La position des deux solitons est représentée en fonction du temps. Après la zone de collision, les deux solitons se déplacent avec une vitesse finale v_f nettement plus faible qu'avant leur interaction : une partie de l'énergie est passée dans l'oscillation de la pente des deux solitons. La discontinuité apparente des trajectoires provient du fait que, au moment de la collision, le champ ϕ passe momentanément par une valeur très faible et que la position du soliton et de l'antisoliton ne sont plus définies.

Comme nous avons vu qu'un kink et un anti-kink interagissent de manière attractive, si le transfert d'énergie cinétique vers le mode interne est trop important, les deux excitations ne peuvent s'échapper de leur potentiel attractif et forment alors une paire d'excitations oscillant l'une par rapport à l'autre, comme le breather de sine-Gordon : c'est ce que montre l'exemple présenté sur la figure 5.5. Il est cependant important de noter que le breather n'est pas une solution exacte du modèle ϕ^4, puisqu'une émission permanente d'énergie sous la forme des états du continuum induit une lente diminution de son amplitude.

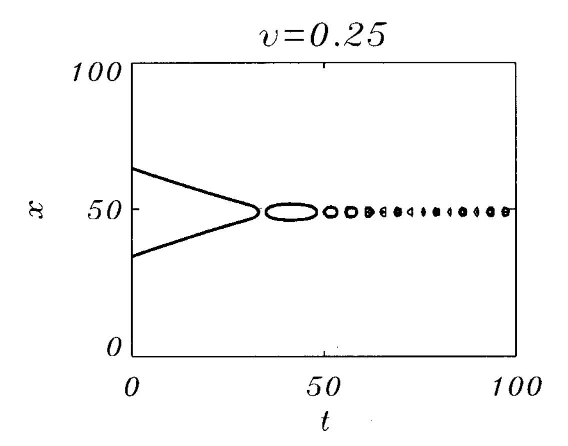


FIG. 5.5 – Collision d'un kink et d'un anti-kink dans le modèle ϕ^4 avec une *faible* vitesse initiale v_i. Après la zone de collision, les deux solitons forment un breather, comme le montrent les oscillations temporelles.

Il existe donc une vitesse critique v_c en-dessous de laquelle le transfert d'énergie vers le mode interne est supérieur à l'énergie cinétique initiale. Le soliton est capturé par le potentiel attractif de l'antisoliton (fig. 2.10). Cependant l'énergie transmise vers le mode interne n'est pas perdue pour les deux excitations puisque le mode interne est *localisé*. Par conséquent, une collision peut exciter ou désexciter un mode interne. Dans ce dernier cas, il y a un transfert de l'énergie du mode interne vers l'énergie cinétique des solitons. La possibilité de désexciter le mode interne dans une collision se déduit simplement de l'équation d'évolution. Puisqu'elle ne contient que des dérivées d'ordre deux par rapport à la variable temporelle, elle est invariante par changement du signe de t. Par conséquent, si les deux solitons arrivent au second point de collision avec des phases du mode interne identiques à ce qu'elles étaient à la sortie de la première collision, la seconde collision sera exactement l'inverse de la première et désexcitera le mode interne : les deux solitons auront alors assez d'énergie pour échapper à leur potentiel attractif et repartiront à l'infini. C'est ce que met en évidence la figure 5.6.

On a, par conséquent, dans ce cas, un phénomène de collision résonante à basse vitesse qui se traduit par une réflexion des deux excitations. Ce mécanisme a lieu lorsque la durée entre les deux collisions vaut $T_{12} = nT_1 + \delta$, où δ est un facteur de phase lié à la phase du mode interne après collision et T_1 la période du mode interne. C'est ce mécanisme qui est à l'origine d'une série de *fenêtres résonantes* dans lesquelles les deux solitons se séparent, bien que leur vitesse initiale ait été inférieure à la vitesse critique v_c (cf. fig. 5.7).

Un phénomène analogue existe [33] dans le modèle double sine-Gordon pour lequel le mode interne correspond à une oscillation de la distance relative des deux « sous-solitons ». Dans ce cas, il a été possible de mettre

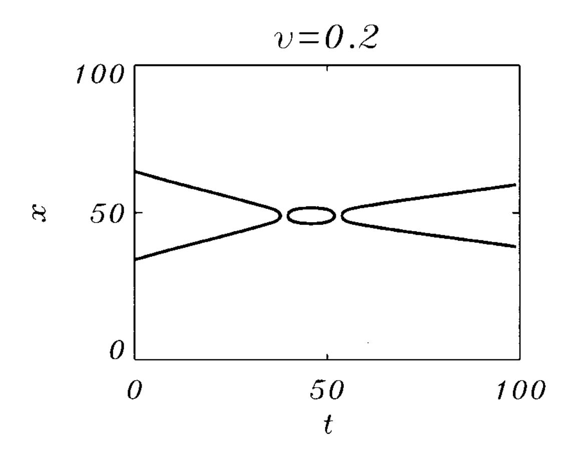


FIG. 5.6 – Collision résonante d'un kink et d'un anti-kink dans le modèle ϕ^4. Après la première collision, les deux solitons ont leur mode interne excité alors qu'ils repartent sans excitation interne après la seconde collision.

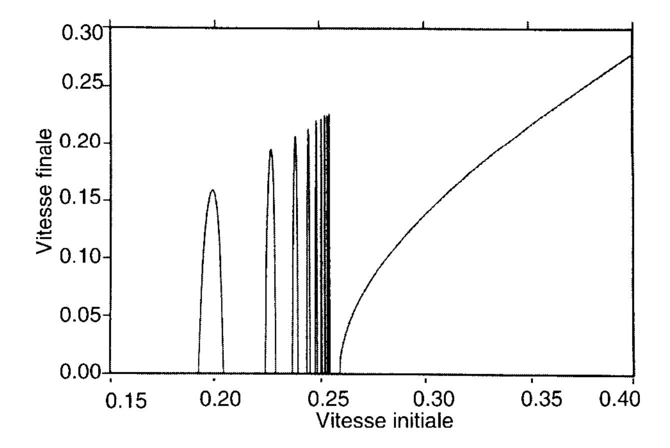


FIG. 5.7 – Diagramme donnant la vitesse de sortie en fonction de la vitesse initiale pour la collision d'un soliton et d'un antisoliton dans le modèle ϕ^4 (d'après la référence [34]).

en évidence des résonances d'ordre deux (c'est-à-dire se produisant après la troisième collision), trois, quatre, etc. Sur un diagramme analogue à celui de la figure 5.7, les résonances d'ordre deux se traduisent par une série de fenêtres secondaires de part et d'autre de la résonance principale. Chaque fenêtre secondaire ayant à son tour sur ses bords un ensemble de fenêtres tertiaires, etc. On observe en outre une auto-similarité qui s'interprète bien en termes d'excitation du mode interne : la distribution des fenêtres secondaires par rapport au bord d'une fenêtre primaire est identique, à un facteur d'échelle près,

à la distribution des fenêtres primaires par rapport à la vitesse critique v_c. Le diagramme $v_f = f(v_i)$ prend donc une allure fractale. L'auto-similarité ne se poursuit cependant pas à toutes les échelles car, outre l'excitation du mode interne, chaque collision excite aussi évidemment des modes du continuum qui ne sont pas localisés et dont l'énergie rayonnée loin des solitons est perdue pour les deux excitations.

Cet exemple illustre l'importance du spectre des excitations autour de la solution soliton pour déterminer la dynamique des solitons. Cependant, pour étudier la dynamique complexe qui résulte de l'existence du mode interne du soliton ϕ^4, il faut avoir recours à une autre méthode qu'un simple développement perturbatif autour du soliton. On peut utiliser la méthode des coordonnées collectives que nous présentons au chapitre suivant.

Chapitre 6

Méthode des coordonnées collectives

Le chapitre précédent à mis en évidence la puissance des descriptions perturbatives mais aussi leurs limites : lorsqu'on applique à un soliton une perturbation qui provoque son mouvement d'ensemble, la perturbation diverge.

Nous avons vu par ailleurs que les solitons sont des « objets » particulièrement stables dont les propriétés font penser à celles de quasi-particules. Il apparaît donc naturel d'introduire une coordonnée de position pour cette quasi-particule. En utilisant cette approche, on remplace le champ et son intensité, décrits par une infinité de degrés de liberté, par un objet repéré par une ou plusieurs coordonnées que l'on appelle *coordonnées collectives*, puisqu'elles représentent tout un ensemble de degrés de liberté du système physique.

Cette méthode n'a de sens que si les propriétés du champ sont telles que l'« objet » que l'on caractérise par les coordonnées collectives a une réelle individualité même en présence de perturbations. Nous verrons que l'hypothèse est tout à fait justifiée dans le cas des solitons. Cependant, la méthode des coordonnées collectives est une méthode variationnelle, et comme toute méthode de ce type, elle ne peut donner des résultats satisfaisants que si la classe de fonctions que l'on utilise pour approcher la solution exacte est appropriée, c'est-à-dire si l'on choisit convenablement les coordonnées collectives.

6.1 Soliton sine-Gordon en présence d'une impureté : méthode du lagrangien effectif

Considérons par exemple le cas de la chaîne de pendules dans laquelle l'un des pendules, tout en ayant le même moment d'inertie que les autres, a son

centre de gravité placé à une distance de l'axe *différente* des autres : cela modifie donc son énergie potentielle de pesanteur. Si le centre de gravité du pendule défectueux, d'indice 0, est situé à la distance $\ell(1-\varepsilon)$ au lieu de ℓ, l'hamiltonien de la chaîne est

$$H = \sum_n \frac{1}{2} I \left(\frac{\mathrm{d}\theta_n(t')}{\mathrm{d}t'} \right)^2 + \frac{1}{2} C(\theta_{n+1} - \theta_n)^2 + mg\ell \left(1 - \varepsilon\delta_{n0}\right)\left(1 - \cos\theta_n\right) \quad . \tag{6.1}$$

En passant à l'approximation des milieux continus et en introduisant des variables temporelles et spatiales sans dimension convenablement choisies, on obtient l'hamiltonien

$$H = \int \mathrm{d}x \left[\frac{1}{2}\theta_t^2 + \frac{1}{2}\theta_x^2 + \left(1 - \varepsilon\delta(x)\right)\left(1 - \cos\theta\right) \right] \quad . \tag{6.2}$$

On se propose de calculer l'effet de la perturbation $\varepsilon\delta(x)$ sur un soliton sine-Gordon arrivant sur le défaut avec une vitesse faible ($v \ll 1$).

L'idée de la méthode consiste à admettre que le soliton sine-Gordon non perturbé

$$\theta(x,t) = 4 \arctan \exp \left(\frac{x - vt}{\sqrt{1 - v^2}} \right) \simeq 4 \arctan \exp \left(x - vt\right) \qquad \text{pour} \quad v \ll 1 \quad , \tag{6.3}$$

conserve sa forme mais que sa position n'est plus égale à vt mais à une valeur $X(t)$ qu'on se propose de déterminer. On fait donc l'hypothèse qu'en présence de la perturbation la solution s'écrit

$$\theta_X(x,t) = 4 \arctan \exp \left[x - X(t)\right] \quad , \tag{6.4}$$

où $X(t)$ est la coordonnée collective de position du soliton. La méthode apparaît donc comme une méthode variationnelle. On cherche une solution approchée dans une classe particulière de fonctions (ici l'expression de la solution soliton) dépendant de paramètres (ici $X(t)$) que l'on va déterminer pour obtenir une approximation optimale de la solution exacte. Dans la mesure où l'on décrit le soliton avec la même forme fonctionnelle que la solution non perturbée, la méthode ne peut pas décrire ses déformations, contrairement à l'approche perturbative du chapitre 5. On peut remarquer que l'on aurait également pu choisir une solution de la forme

$$\theta(x,t) = 4 \arctan \exp \left(\frac{x - X(t)}{\sqrt{1 - \dot{X}^2}} \right) \quad , \tag{6.5}$$

pour introduire le facteur de contraction de Lorentz. Cette expression complique fortement les calculs et l'amélioration qu'elle apporte est illusoire car, dans la méthode des coordonnées collectives, on ignore d'autres corrections qui peuvent être plus grandes et en particulier une éventuelle émission de

radiations par le soliton quand il rencontre l'impureté. La méthode de perturbation étudiée au chapitre précédent peut inclure les déformations du soliton ou les ondes non localisées qu'il est susceptible d'émettre, mais elle est incapable de décrire une modification profonde de son mouvement comme, par exemple, une réflexion par l'impureté.

Pour écrire les équations d'évolution du système, le formalisme hamiltonien est peu commode car il impose de déterminer le moment conjugué de la variable collective. Il est plus simple de considérer le lagrangien

$$L = \int \mathrm{d}x \left[\frac{1}{2}\theta_t^2 - \frac{1}{2}\theta_x^2 - (1 - \varepsilon\delta(x))\,(1 - \cos\theta) \right] \quad , \tag{6.6}$$

dont dérive l'équation du mouvement

$$\theta_{tt} - \theta_{xx} + (1 - \varepsilon\delta(x)) \sin\theta = 0 \quad . \tag{6.7}$$

En reportant l'ansatz (6.4) dans le lagrangien (6.6), on obtient l'expression suivante

$$\begin{aligned} L &= \int \mathrm{d}x \left[2\dot{X}^2 \operatorname{sech}^2(x - X) - 2\operatorname{sech}^2(x - X) - 2\,(1 - \varepsilon\delta(x))\operatorname{sech}^2(x - X) \right] \\ &= 4\dot{X}^2 - U(X) \qquad \text{en posant} \quad U(X) = 8 - 2\varepsilon \operatorname{sech}^2 X \quad , \end{aligned} \tag{6.8}$$

dans laquelle on a noté par un point la dérivée par rapport au temps de la fonction d'une variable $X(t)$, comme on le fait souvent en mécanique. L'expression à laquelle on est arrivé après intégration spatiale est formellement identique au lagrangien d'une particule mobile dans un potentiel $U(X)$. Cette particule a une masse $m_0 = 8$, conforme à la valeur de la masse du soliton que l'on avait obtenue par le calcul de l'énergie du soliton sine-Gordon (cf. équation (2.26) écrite avec des variables sans dimension).

En l'absence d'impureté ($\varepsilon = 0$), le potentiel est constant : le mouvement du soliton s'effectuera donc à vitesse constante comme attendu. En revanche, si $\varepsilon > 0$, on trouve que l'impureté crée un potentiel attractif pour le soliton. À partir de l'équation du mouvement qui résulte de ce lagrangien

$$8\ddot{X} + 4\varepsilon \operatorname{sech}^2 X \tanh X = 0 \quad , \tag{6.9}$$

on obtient par multiplication par $\dot{X}$ et intégration

$$\dot{X}^2 = \frac{\varepsilon}{2} \operatorname{sech}^2 X + C \quad , \tag{6.10}$$

C étant une constante d'intégration que l'on peut déterminer en utilisant la situation que l'on s'est imposée comme condition initiale : le soliton est envoyé sur l'impureté avec la vitesse v. Ainsi, pour $X \to -\infty$, $\dot{X} = v$, ce qui donne $C = v^2$. Après séparation des variables, on a

$$\mathrm{d}t = \frac{\mathrm{d}X}{\sqrt{v^2 + \varepsilon/(2\cosh^2 X)}} \quad . \tag{6.11}$$

En choisissant l'origine des temps lorsque $X = 0$, on obtient

$$t = \int_0^X \mathrm{d}\xi \, \frac{\cosh \xi}{\sqrt{v^2 \cosh^2 \xi + \frac{\varepsilon}{2}}} \quad . \tag{6.12}$$

En introduisant la constante $\alpha = \sqrt{1 + \varepsilon/(2v^2)}$ et le changement de variable $\alpha u = \sinh \xi$, on aboutit à

$$t = \frac{1}{v} \int_0^{\sinh X/\alpha} \frac{\mathrm{d}u}{\sqrt{1+u^2}} = \frac{1}{v} \Big[\arg\, \sinh u \Big]_0^{\sinh X/\alpha} \tag{6.13}$$

qui conduit finalement à la solution

$$X(t) = \operatorname{arcsinh} (\alpha \, \sinh(vt)) \quad . \tag{6.14}$$

Ce calcul permet donc de déterminer la position du soliton à chaque instant en présence de l'impureté. Dans le cas $\varepsilon > 0$, qui correspond à une impureté attractive, la solution (6.14) indique que le soliton accélère en s'approchant de l'impureté, puis reprend sa vitesse initiale quand il l'a dépassée (cf. fig. 6.1). Comme le soliton a parcouru une partie de son trajet à une vitesse supérieure à celle qu'il aurait sans impureté, on trouve que le seul effet de l'impureté sur la dynamique du soliton est une avance de phase.

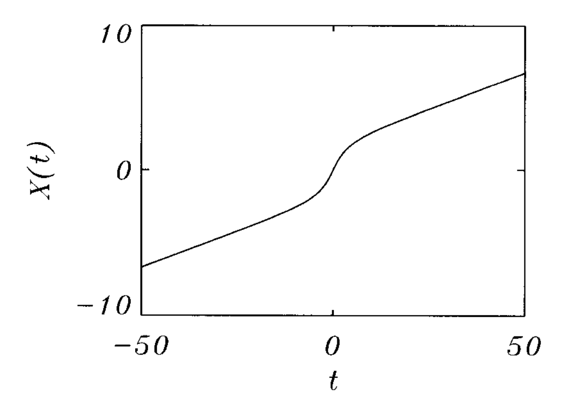


FIG. 6.1 – Évolution temporelle de la position du soliton $X(t)$ dans le cas $v = 0{,}1$ et $\varepsilon = 0{,}3$.

Cependant, une étude par simulation numérique directe à partir de l'équation de champ (6.7) montre qu'à faible vitesse initiale le soliton peut émerger de l'interaction avec l'impureté avec une vitesse inférieure à sa vitesse initiale, ou même être *piégé par l'impureté*. Le calcul par les coordonnées collectives que nous venons de présenter est donc, dans certains cas, en contradiction complète avec le résultat correct. C'est une illustration classique des limitations des méthodes variationnelles : la réussite de la méthode repose de

manière essentielle sur la forme de solution que l'on se donne, et l'on ne peut trouver que les résultats que cette forme permet de décrire.

Or, la fonction (6.4) choisie suppose que le champ est décrit uniquement par un soliton. Quand celui-ci est à grande distance de l'impureté (pour $t \to \pm\infty$), il n'interagit plus avec l'impureté, et l'énergie du système est constituée uniquement de l'énergie du soliton. Puisque le système est conservatif, le soliton retrouve pour $t \to +\infty$ l'énergie qu'il avait pour $t \to -\infty$. Il n'est donc pas surprenant de trouver qu'il conserve sa vitesse après avoir traversé l'impureté. L'augmentation temporaire de vitesse au niveau de l'impureté s'explique également par la conservation de l'énergie, puisque dans le cas $\varepsilon > 0$, l'énergie potentielle de pesanteur diminue lorsque le soliton arrive sur le pendule « défectueux ». Cette diminution doit donc être compensée par une augmentation de l'énergie cinétique pour conserver l'énergie totale.

Le résultat décevant que nous avons obtenu ne signifie pas que la méthode des coordonnées collectives est intrinsèquement mauvaise, mais il doit nous inciter à prendre des précautions pour l'appliquer correctement.

6.2 Amélioration de la méthode : introduction d'une seconde coordonnée collective

Pour fournir des résultats corrects, la méthode des coordonnées collectives doit être précédée d'une analyse des propriétés du système pour déterminer quels sont les modes qui peuvent intervenir dans sa dynamique. On peut s'aider de simulations numériques des équations complètes qui donnent souvent des indications utiles. Elles montrent ainsi que, même lorsque le soliton n'est pas piégé, la vitesse finale est inférieure à la vitesse initiale et qu'il subsiste sur le site de l'impureté une oscillation localisée. D'autres indications très importantes peuvent être données par l'étude des équations de mouvement linéarisées.

Considérons la version linéarisée de l'équation (6.7)

$$\theta_{tt} - \theta_{xx} + (1 - \varepsilon\delta(x))\,\theta = 0 \quad . \tag{6.15}$$

Elle possède des solutions oscillantes de la forme $\theta(x,t) = e^{i\Omega t} f(x)$, où la fonction $f(x)$ est solution de l'équation

$$-f_{xx} + (1 - \varepsilon\delta(x)) f(x) = \Omega^2 f(x) \tag{6.16}$$

qui est encore une équation formellement analogue à une équation de Schrödinger, avec un potentiel correspondant à la fonction δ de Dirac. Un tel potentiel possède un état lié

$$f(x) = \frac{A}{2}\, e^{-\dfrac{\varepsilon|x|}{2}} \qquad \text{correspondant à} \qquad \Omega^2 = 1 - \frac{\varepsilon^2}{4} \quad , \tag{6.17}$$

qui décroît exponentiellement quand on s'éloigne de l'impureté. Par conséquent, outre la solution soliton et les ondes planes non localisées, l'équation (6.7) possède la solution réelle localisée suivante :

$$\theta(x,t) = \frac{A}{2}\, e^{i\Omega t}\, e^{-\dfrac{\varepsilon|x|}{2}} + \text{c.c.} = A\, \cos\Omega t\, e^{-\dfrac{\varepsilon|x|}{2}} \quad . \tag{6.18}$$

Comme ce mode localisé peut stocker une partie de l'énergie du soliton, on doit absolument l'inclure dans les coordonnées collectives pour obtenir un résultat correct. Sa dépendance spatiale est déterminée par la nature de l'impureté (c'est-à-dire la valeur du paramètre ε), mais son amplitude dépend de l'interaction avec le soliton. On choisit donc

$$\theta(x,t) = 4\arctan\left[\exp\left(x - X(t)\right)\right] + a(t)\, e^{-\dfrac{\varepsilon|x|}{2}} \quad , \tag{6.19}$$

pour le calcul des coordonnées collectives. On introduit ainsi *deux* coordonnées collectives : la position du soliton $X(t)$ et l'amplitude du mode localisé $a(t)$.

On procède ensuite comme précédemment pour obtenir un lagrangien effectif, en faisant l'hypothèse que $\dot{X}$, a et $\dot{a}$ sont faibles ($\dot{X}$, a et $\dot{a}$ d'ordre ε), c'est-à-dire que la solution suppose un mode d'impureté faiblement excité et comme précédemment un soliton lent. Il suffit alors de remplacer l'ansatz (6.19) dans l'expression du lagrangien (6.6), en se limitant aux ordres les plus bas. On développe le terme non-linéaire en tenant compte du fait que le mode d'impureté n'est que faiblement excité, ce qui donne

$$1 - \cos\theta = 1 - \cos\theta_X + a\, e^{-\frac{\varepsilon|x|}{2}} \sin\theta_X + \frac{a^2}{2} e^{-\varepsilon|x|} \cos\theta_X + \mathcal{O}(a^3) \tag{6.20}$$

$$\begin{aligned} &= 2\,\text{sech}^2(x - X) - 2a e^{-\frac{\varepsilon|x|}{2}}\, \text{sech}(x - X)\tanh(x - X) \\ &\qquad + \frac{a^2}{2} e^{-\frac{\varepsilon|x|}{2}} \left(1 - 2\,\text{sech}^2(x - X)\right) + \mathcal{O}(a^3) \quad . \end{aligned} \tag{6.21}$$

Lorsque l'on procède à l'intégration spatiale pour obtenir le lagrangien effectif, on distingue deux catégories de termes traduisant l'interaction soliton-impureté :

- les termes d'interaction *via* le site d'impureté pour les intégrales contenant la fonction $\delta(x)$;
- les termes d'interaction directe pour les intégrales de la forme

$$\int \mathrm{d}x\, e^{-\varepsilon|x|}\, \text{sech}(x - X) \quad . \tag{6.22}$$

  Elles sont formellement calculables mais faibles sauf lorsque la variable collective X est proche de l'impureté ($X \simeq 0$). Comme ces termes sont facteurs de $\dot{a}\dot{X}$, ou bien de a^2 qui sont déjà d'ordre ε^2 par hypothèse, on peut les négliger.

Compte tenu des approximations précisées ci-dessus, on obtient, pour le lagrangien effectif, l'expression

$$L = 4\dot{X}^2 - 8 + 2\varepsilon \operatorname{sech}^2 X + \frac{1}{\varepsilon}\left[\dot{a}^2 - \Omega^2 a^2\right] + \varepsilon a F(X) + \varepsilon a^2 G(X) \quad , \quad (6.23)$$

en introduisant la pulsation du mode localisé $\Omega^2 = 1 - \varepsilon^2/4$, ainsi qu'en posant $G(X) = -\operatorname{sech}^2 X$ et $F(X) = 2 \operatorname{sech} X \tanh X$. Ce lagrangien généralise l'expression (6.8) trouvée précédemment puisque l'on retrouve la contribution du soliton, mais également une contribution du mode localisé seul et enfin un terme de couplage responsable de l'échange d'énergie entre le soliton et le mode localisé.

Les équations d'évolution pour les deux coordonnées collectives qui dérivent de ce lagrangien sont :

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial L}{\partial \dot{X}} - \frac{\partial L}{\partial X} = 0 = 8\ddot{X} + 4\varepsilon \operatorname{sech}^2 X \tanh X - \varepsilon a F'(X) - \varepsilon a^2 G'(X) \quad (6.24)$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial L}{\partial \dot{a}} - \frac{\partial L}{\partial a} = 0 = \frac{1}{\varepsilon}\left[2\ddot{a} + 2\Omega^2 a\right] - \varepsilon F(X) - 2\varepsilon a G(X) \quad , \quad (6.25)$$

F' et G' étant les dérivées de F et G par rapport à X. Les équations (6.24) et (6.25) sont beaucoup plus simples que les équations de champ initiales puisqu'il ne s'agit que de deux équations différentielles couplées. C'est l'intérêt de la méthode des coordonnées collectives : elle réduit un problème avec un nombre infini de degrés de liberté à un problème à deux degrés de liberté.

Néanmoins, ces deux équations sont encore difficiles à résoudre analytiquement puisqu'elles sont non-linéaires. Le comportement du système peut être aisément étudié à partir des deux équations par simulation numérique avec les conditions initiales suivantes : on choisit une grande valeur négative pour X, $\dot{X}(0)$ est égal à la vitesse initiale v, et enfin, $a(0) = \dot{a}(0) = 0$, car le mode localisé est initialement non excité. Par rapport à la simulation numérique du système complet le gain est considérable puisque l'on s'est ramené à deux équations différentielles au lieu d'une équation aux dérivées partielles.

Mais, bien sûr, après avoir effectué un calcul analytique pour réduire la complexité du problème, on aimerait poursuivre la méthode analytique jusqu'au bout. À défaut d'obtenir une expression pour $X(t)$ et $a(t)$, il est possible d'obtenir analytiquement une condition approchée pour le piégeage du soliton en déterminant la quantité d'énergie qu'il transmet au mode localisé. Les étapes sont les suivantes :

- dans chaque équation, on néglige le terme d'ordre le plus élevé, $\varepsilon a^2 G'(X)$ dans la première et $\varepsilon a G(X)$ dans la seconde ;
- on cherche ensuite à évaluer l'excitation du mode localisé en admettant que, pendant la phase où le soliton s'approche de l'impureté, $X(t)$ évolue selon la loi (6.14), trouvée en l'absence du mode localisé.

On peut alors résoudre l'équation d'évolution du mode localisé qui est forcée par un terme $F(X(t)) = f(t)$ qui, selon la seconde hypothèse, est

maintenant connu

$$\ddot{a} + \Omega^2 a = \frac{\varepsilon^2}{2} \frac{2\sinh X(t)}{\cosh^2 X(t)} = \frac{\varepsilon^2 \alpha \sinh vt}{1 + \alpha^2 \sinh^2 vt} = f(t) \quad . \tag{6.26}$$

Cette équation est plus facile à résoudre en posant $\xi = \dot{a} + i\Omega a$, car on obtient l'équation du premier ordre

$$\dot{\xi} - i\Omega\xi = f(t) \quad . \tag{6.27}$$

La solution de l'équation sans second membre est de la forme $\xi(t) = A\, e^{i\Omega t}$. Par la méthode de la variation de la constante A, on obtient $\dot{A}\, e^{i\Omega t} = f(t)$. On en déduit par conséquent que

$$\xi(t) = e^{i\Omega t} \int_{-\infty}^{t} \mathrm{d}\tau\, e^{-i\Omega\tau} f(\tau) \quad . \tag{6.28}$$

L'expression de l'énergie stockée dans le mode localisé peut être déduite de l'expression du lagrangien (6.23), en pensant que, dans le lagrangien, l'énergie potentielle est précédée du signe $-$. La valeur de la somme de l'énergie cinétique et de l'énergie potentielle dans le mode localisé est donc

$$E_{\mathrm{loc}} = \frac{1}{\varepsilon} \left(\dot{a}^2 + \Omega^2 a^2\right) = \frac{1}{\varepsilon} |\xi|^2 \tag{6.29}$$

dont on peut déduire l'énergie qui subsiste dans le mode localisé après le passage du soliton

$$E_{\mathrm{loc}}^{\infty} = \lim_{t \to +\infty} E_{\mathrm{loc}} = \frac{1}{\varepsilon} \left| \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}\tau\, e^{-i\Omega\tau} f(\tau) \right|^2 \quad , \tag{6.30}$$

correspondant au carré du module de la composante de Fourier de $f(\tau)$ à la pulsation du mode localisé.

On obtient une condition approchée pour le piégeage en égalant l'énergie cinétique initiale du soliton $E_c = 4v^2$ et l'énergie finale piégée dans le mode localisé $E_{\mathrm{loc}}^{\infty}$, c'est-à-dire en écrivant que toute l'énergie cinétique initiale du soliton est transférée au mode localisé. Malgré les approximations faites, le résultat est en bon accord avec les simulations numériques.

Les équations (6.24) et (6.25) pour les coordonnées collectives peuvent même prévoir des effets plus subtils comme des résonances dans la diffusion des solitons par l'impureté : de manière très similaire à la description présentée dans le cadre du modèle ϕ^4, après une ou deux oscillations autour du site d'impureté, le soliton piégé peut regagner l'énergie temporairement stockée dans le mode localisé et se détacher de l'impureté [53].

Les exemples d'utilisation des coordonnées collectives que nous avons traités ont concerné les solitons topologiques du modèle sine-Gordon, mais la

même approche peut être appliquée à d'autres équations à solitons. Le cas des solitons topologiques est favorable, non seulement car ils sont extrêmement stables, mais aussi parce que leur amplitude est fixée ce qui permet d'envisager une première approche avec une seule variable collective : la variable de position. Dans le cas du modèle ϕ^4, il est nécessaire d'inclure le mode localisé de déformation du soliton en tant que coordonnée collective car il peut stocker de l'énergie comme nous l'avons vu à propos des collisions.

D'une manière générale, pour déterminer les coordonnées collectives dont on doit tenir compte, il est utile d'examiner le spectre des excitations localisées du système en l'absence et en présence d'un soliton ; on y trouvera toujours le mode de translation qui sera associé à la coordonnée de position, mais éventuellement d'autres modes (comme le mode localisé du soliton ϕ^4 ou le mode d'impureté de l'exemple que nous venons de traiter). Il faudra faire correspondre une coordonnée collective à chacun d'entre eux. Enfin, lorsque l'on considère des solitons non-topologiques comme pour les équations de KdV ou de NLS, on doit nécessairement inclure leur amplitude dans les coordonnées collectives puisqu'elle est susceptible de varier, ainsi que, pour le cas de NLS, un terme de phase puisque le soliton de l'équation de NLS est une solution à deux paramètres.

La méthode du lagrangien effectif que nous avons présentée jusqu'à présent est simple mais elle soulève des questions délicates :

- Comment prendre en compte les degrés de liberté ignorés et en particulier le rayonnement de modes non localisés ?
- Comment tenir compte correctement des degrés de liberté que représentent les variables collectives, qui doivent par conséquent être décomptés des autres degrés de liberté du système ?

Une théorie plus complète a été développée [28] pour introduire les variables collectives dont une définition rigoureuse est donnée en termes d'équations de contraintes supplémentaires. Pour comprendre la nécessité de ces contraintes, il faut penser que, si l'on veut pouvoir décrire simultanément la position du soliton et ses éventuelles déformations non localisées, il faut être capable de séparer, sans ambiguïté, dans l'écart entre la solution exacte et la solution analytique à un soliton, la partie que l'on attribue à un petit déplacement du soliton de la partie que l'on attribue à sa déformation. L'étude de la dynamique du système en présence de ces contraintes est fondée sur le formalisme de Dirac pour la résolution des équations d'Hamilton sous contraintes. On peut ainsi écrire de manière *exacte* les équations d'évolution des coordonnées collectives en tenant compte de tous les degrés de liberté, y compris les modes non localisés.

Chapitre 7

La méthode d'inversion des données de diffusion

La méthode d'inversion des données de diffusion, ou « méthode inverse », qui a été proposée en 1974 pour l'équation de KdV par Gardner, Greene, Kruskal et Miura [61], puis développée dans la période 1974-1978, constitue l'apogée de la théorie des solitons sous son aspect mathématique. Elle fournit en effet un traitement systématique des systèmes intégrables dont elle permet d'obtenir l'ensemble des solutions. Elle montre en particulier comment les solitons jouent un rôle de « modes normaux non-linéaires » comme les modes de Fourier pour une équation linéaire [12].

La présentation complète de la méthode inverse n'est pas l'un des objectifs de cet ouvrage, mais nous l'introduisons cependant dans le cas de l'équation de KdV qui peut être traité assez simplement et permet de comprendre les idées générales de cette approche. Nous donnerons ensuite une esquisse de la généralisation [4].

7.1 La méthode inverse pour l'équation de KdV

7.1.1 Le principe de la méthode inverse

On se propose d'étudier l'évolution temporelle d'une condition initiale localisée spatialement $u(x, t = 0)$ obéissant à l'équation de KdV écrite sous la forme

$$u_t - 6uu_x + u_{xxx} = 0 \quad . \tag{7.1}$$

On peut noter que le signe du terme non-linéaire est opposé à celui que nous avions utilisé dans le chapitre 1, qui était le signe qui s'introduisait naturellement à partir des équations de l'hydrodynamique en eau peu profonde (cf. équation (1.3)). Le signe que nous adoptons ici est commode pour les calculs

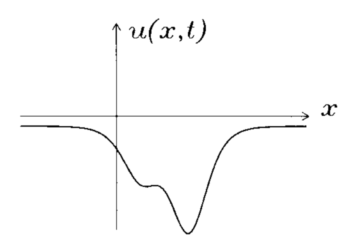


FIG. 7.1 – Allure schématique du potentiel de l'équation de Schrödinger (7.2).

mais il est facile de passer de l'un à l'autre en changeant le signe de la fonction inconnue $u = -\phi$.

La méthode repose sur la définition du problème linéaire associé suivant : on considère l'équation de Schrödinger

$$\left[-\frac{d^2}{dx^2} + u(x,t)\right] \psi(x) = \lambda\, \psi(x) \tag{7.2}$$

qui est une équation aux valeurs propres. Le potentiel u (fig. 7.1) correspond à la solution cherchée de l'équation de KdV et dépend par conséquent d'un paramètre, la variable t de l'équation de KdV. Puisque la solution u est localisée ($\lim_{|x|\to\infty} u(x,t) = 0$), l'équation de Schrödinger (7.2) possède en général :

- des valeurs propres *discrètes*, que nous noterons λ_m, associées à des solutions ψ localisées spatialement ;
- un *spectre continu*, noté $\lambda_k = k^2$ (nous choisissons $k \geq 0$), associé à des fonctions propres ayant un comportement en onde plane $\psi \simeq e^{\pm ikx}$ à grande distance.

On peut caractériser le potentiel u en étudiant ses propriétés de diffusion, *i.e.* en le caractérisant par ses coefficients de transmission T et de réflexion R pour une onde plane incidente e^{-ikx}. Les trois quantités λ_m, T et R dépendent du potentiel, et par conséquent sont des fonctions du paramètre t.

Nous allons montrer un *théorème* qui indique que, si $u(x,t)$ évolue selon l'équation de KdV, alors :

- les valeurs propres discrètes λ_m sont indépendantes du temps t ;
- les coefficients R et T peuvent être calculés facilement en fonction de leur valeur à l'instant initial $t = 0$.

La *conséquence* est que, si l'on donne la condition initiale $u(x, t = 0)$, on peut calculer les valeurs de λ_m, T et R pour $t = 0$ en résolvant un problème linéaire. Connaissant ces trois quantités à tout instant ultérieur, en utilisant les résultats du théorème, on connaît les caractéristiques de diffusion du potentiel que l'on cherche à déterminer. Comme il existe une méthode linéaire, appelée méthode d'inversion des données de diffusion, permettant de reconstruire un potentiel à partir de ses caractéristiques de diffusion, on peut déterminer $u(x,t)$ par une *série d'étapes linéaires*.

On peut donc schématiser la « méthode inverse » de la façon suivante :

$u(x, t=0)$	Résolution de KdV → Problème non-linéaire	$u(x,t)$
Résolution du problème linéaire associé ↓		↑ Inversion des données de diffusion
λ_m, $R(t=0)$, $T(t=0)$	Évolution des → données de diffusion	λ_m, $R(t)$, $T(t)$

7.1.2 L'inversion des données de diffusion

Considérons le problème de Schrödinger :

$$\psi_{xx} - [u(x) - \lambda]\ \psi(x) = 0 \tag{7.3}$$

avec la condition $\lim_{|x| \to \infty} u(x) = 0$, dans lequel nous n'indiquons pas explicitement la dépendance temporelle pour alléger la notation.

Les **états liés** dont l'énergie est inférieure à la valeur du potentiel à l'infini, correspondent à des valeurs propres négatives, que nous noterons $\lambda_m = -\kappa_m^2$ en prenant $\kappa_m > 0$. La fonction d'onde associée, ψ_m, est normalisable et nous la choisissons de norme unité.

À grande distance, le potentiel devient négligeable, réduisant par conséquent l'équation à

$$\frac{\mathrm{d}\psi_m}{\mathrm{d}x^2} - \kappa_m^2\, \psi_m(x) = 0 \tag{7.4}$$

qui donne le comportement asymptotique de la fonction d'onde en $\pm\infty$:

$$\psi_m \sim e^{\mp \kappa_m x} \quad . \tag{7.5}$$

Le principe de l'inversion des données de diffusion consiste à reconstruire le potentiel à partir du comportement des solutions à grande distance. Compte tenu de ce qui précède, pour les états liés, il sera donné par les quantités

$$C_m = \lim_{x \to +\infty} \psi_m(x)\, e^{\kappa_m x} \tag{7.6}$$

où $\psi_m(x)$ est la solution normée. La condition, $\lim_{|x| \to \infty} u(x) = 0$, assure que cette limite existe.

Les **états du continuum** correspondent au contraire aux valeurs propres positives que nous noterons $\lambda_k = k^2$. Les fonctions d'ondes correspondantes ne sont pas normalisables puisque leur comportement à grande distance est oscillant en $e^{\pm ikx}$. Si l'on étudie la diffusion par le potentiel d'une onde du

continuum venant de $+\infty$, la solution est de la forme

$$\psi_k(x) \simeq \begin{cases} e^{-ikx} + R(k)\,e^{ikx} & \text{pour } x \to +\infty \\ T(k)\,e^{-ikx} & \text{pour } x \to -\infty \end{cases} \quad , \tag{7.7}$$

avec la condition traduisant la conservation de l'énergie $|R|^2 + |T|^2 = 1$.

La connaissance du comportement de ψ lorsque x tend vers $+\infty$, c'est-à-dire la connaissance de λ_m (ou κ_m), C_m et $R(k)$) suffit à déterminer le potentiel diffusant $u(x)$. Ce problème de l'inversion des données de diffusion a fait l'objet de multiples études mathématiques en raison de son importance pratique :

- En mécanique quantique, la seule façon que l'on ait d'accéder aux potentiels d'interaction entre particules est d'analyser les résultats d'expérience de diffusion de faisceaux de particules par une cible.
- Il existe de nombreuses applications dans lesquelles on cherche à caractériser un objet par les ondes qu'il diffuse ; c'est ce que l'on fait notamment avec les radars, lorsque l'on fait de la prospection sismique en recherche pétrolière, ou tout simplement lorsque l'on regarde un objet !

Nous donnons ici seulement le résultat principal de cette théorie dont on peut trouver une discussion assez complète dans le livre de Drazin et Johnson [4]. Dans le cas unidimensionnel considéré ici, on obtient le potentiel $u(x)$ par résolution d'une équation intégrale dite équation de Gel'fand-Levitan-Marchenko, qui a la forme suivante

$$u(x) = -2\frac{\mathrm{d}K(x,x)}{\mathrm{d}x} \quad , \tag{7.8}$$

où la fonction K de deux variables, qui est prise deux fois par rapport à la variable x pour le calcul de $u(x)$, vérifie l'équation intégrale

$$K(x,y) + B(x+y) + \int_x^{+\infty} \mathrm{d}z\, B(z+y)K(x,z) = 0 \tag{7.9}$$

avec

$$B(\xi) = \sum_{m=1}^{N} C_m^2(t)e^{-\kappa_m \xi} + \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} R(k,t)\,e^{ik\xi}\,\mathrm{d}k \quad , \tag{7.10}$$

l'indice m désignant l'un des N états liés du potentiel.

L'équation (7.9) peut sembler bien compliquée par rapport à l'équation de KdV initiale mais c'est une équation *linéaire* pour la fonction inconnue $K(x,y)$. On peut remarquer en outre que, dans cette équation, la variable x joue le rôle d'un paramètre puisque l'intégration ne porte pas sur x. Ce n'est donc pas véritablement une équation à deux variables, mais une famille d'équations à une variable. Enfin, il n'est généralement pas utile de résoudre explicitement cette équation pour obtenir des informations sur l'évolution de la condition initiale $u(x,t=0)$. C'est ce qui fait tout l'intérêt de la méthode inverse.

7.1.3 L'évolution temporelle des données de diffusion

Pour compléter l'utilisation de la méthode inverse, nous devons déterminer l'évolution temporelle des données de diffusion λ_m, C_m, $R(k)$, nécessaires pour construire le noyau $B(\xi)$ de l'équation intégrale (7.9). Démontrons maintenant que, comme nous l'avons déjà annoncé, λ_m est indépendant du temps lorsque $u(x,t)$ évolue selon l'équation de KdV.

Pour cela, on repart du problème linéaire associé à l'équation de KdV (7.2), où l'on suppose que u évolue selon l'équation de KdV (7.1). L'équation (7.2) permet tout d'abord d'exprimer la solution sous la forme

$$u = \frac{\psi_{xx}}{\psi} + \lambda \quad , \tag{7.11}$$

expression que l'on reporte ensuite dans l'équation de KdV (7.1). À ce stade, il faut rappeler que la valeur propre du problème de Schrödinger λ ne dépend pas de x, mais qu'elle peut dépendre *a priori* de t, puisqu'il figure dans le potentiel $u(x,t)$. À partir des dérivées temporelle et spatiale de u, telles que, par exemple, $u_t = \psi_{xxt}/\psi - \psi_{xx}\psi_t/\psi^2 + \lambda_t$, et en définissant la quantité

$$S(x,t) = \psi_t + \psi_{xxx} - 3(u+\lambda)\psi_x \quad , \tag{7.12}$$

l'équation de KdV multipliée par ψ^2 s'écrit sous la forme suivante :

$$\lambda_t\psi^2 + \left(\psi S_x - \psi_x S\right)_x = 0 \quad , \tag{7.13}$$

qui permet assez facilement de calculer l'évolution temporelle des paramètres de diffusion.

Théorème 1 : Si $u(x,t)$ évolue selon l'équation de KdV et s'annule à l'infini, les valeurs propres discrètes λ_m du problème linéaire (7.2) sont des constantes.

Démonstration : En intégrant spatialement l'équation (7.13), on obtient

$$\lambda_t \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}x\, \psi^2 + \Big[\psi S_x - \psi_x S\Big]_{-\infty}^{+\infty} = 0 \quad . \tag{7.14}$$

Comme les valeurs propres discrètes sont associées à des fonctions propres normalisables, la première intégrale se réduit à l'unité. Par ailleurs, comme la fonction u s'annule à l'infini, et que ψ est un état lié qui doit donc s'annuler à l'infini de même que ψ_x et ses autres dérivées, S tend également vers zéro à l'infini. Par conséquent, le terme tout intégré, entre crochets, s'annule et l'on obtient $\lambda_t = 0$; λ_m, valeur discrète, est donc une constante.

On ne peut pas utiliser cet argument pour le continuum puisque les fonctions d'ondes du continuum ne s'annulent pas à l'infini et ne sont pas

normalisables. En revanche, le spectre des valeurs propres du continuum ne change pas quand u évolue avec les conditions aux limites $|u| \to 0$ à l'infini ; il est toujours constitué de l'ensemble des valeurs réelles $k \geq 0$. Lorsque l'on souhaite étudier une fonction d'onde $\psi_k(x)$ et le coefficient correspondant $R(k,t)$, *on se donne la valeur de* k, ce qui impose $k_t = 0$. Compte tenu de l'équation (7.13), on obtient

$$(\psi S_x - \psi_x S)_x = 0 \quad , \tag{7.15}$$

ce qui permet d'assurer que la quantité $g(\lambda,t) = (\psi S_x - \psi_x S)$ ne dépend pas de x, mais uniquement de la fonction d'onde étudiée et du temps bien sûr. Par ailleurs,

$$(\psi S_x - \psi_x S)_x = \psi S_{xx} - \psi_{xx} S \tag{7.16}$$

$$= \psi \left[S_{xx} - S\,(u - \lambda)\right] \quad , \tag{7.17}$$

en utilisant l'équation (7.3). La combinaison des équations (7.15) et (7.17) conduit par conséquent à l'équation

$$S_{xx} - S\,(u - \lambda) = 0 \quad , \tag{7.18}$$

puisque la fonction ψ n'est pas identiquement nulle. On trouve, par conséquent, le résultat remarquable que S obéit à la *même* équation que la fonction ψ. Ainsi, pour une valeur propre donnée, S et ψ appartiennent au même espace propre de l'opérateur $(\partial_{xx} - u(x)\cdot)$. Comme les valeurs propres discrètes d'une équation de Schrödinger unidimensionnelle ne sont pas dégénérées [105], S et ψ doivent être proportionnelles,

$$S_m = A\,\psi_m \quad , \tag{7.19}$$

où A est une constante, indépendante de x mais qui peut dépendre *a priori* de t.

– **Théorème 2 :** Si $u(x,t)$ évolue selon l'équation de KdV et s'annule à l'infini, les paramètres de diffusion $C_m(t)$ et $R(k,t)$ évoluent selon les lois

$$C_m(t) = C_m(0)\, e^{4\kappa_m^2 t} \qquad \text{et} \qquad R(k,t) = R(k,0)\, e^{i8k^3 t} \quad . \tag{7.20}$$

Démonstration : Nous allons d'abord nous intéresser aux valeurs propres discrètes avant de considérer le spectre continu.

– Dans le cas des valeurs propres discrètes, en utilisant la relation (7.19) et la définition (7.12) de la fonction S, on obtient

$$A\psi = \psi_t + \psi_{xxx} - 3(u + \lambda)\psi_x \quad . \tag{7.21}$$

Par intégration spatiale de cette équation multipliée par ψ, on aboutit à la relation :

$$A \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}x\, \psi^2}_{=1} = \frac{1}{2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}x\, \psi^2}_{=1} + \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}x\, [\psi\psi_{xxx} - 3(u+\lambda)\psi\psi_x] \quad (7.22)$$

$$A = \quad 0 \quad + \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}x\, [\psi\psi_{xxx} - 3(\psi_{xx} + 2\lambda\psi)\psi_x] \quad (7.23)$$

$$= \Big[\psi\psi_{xx} - 2\psi_x^2 - 3\lambda\psi^2\Big]_{-\infty}^{+\infty} = 0 \quad , \quad (7.24)$$

où l'on a utilisé $u\psi = \psi_{xx} + \lambda\psi$ et le fait que ψ et ses dérivées s'annulent à l'infini (état lié). Puisque la constante A est nulle, on en déduit que S est identiquement nulle dans le cas des valeurs propres discrètes, ce qui implique la relation :

$$\psi_t + \psi_{xxx} - 3(u+\lambda)\psi_x = 0 \qquad \text{avec} \quad \lambda = -\kappa_m^2 \quad . \quad (7.25)$$

Enfin, étant donné qu'à l'infini, la solution u tend vers zéro alors que $\psi_m(x)$ est équivalent à $C_m(t)\, e^{-\kappa_m x}$, on aboutit à l'équation

$$\left[\frac{\mathrm{d}C_m}{\mathrm{d}t} - \kappa_m^3 C_m - 3(-\kappa_m^2)(-\kappa_m C_m)\right] e^{-\kappa_m x} = 0 \quad (7.26)$$

qui démontre la première relation $C_m(t) = C_m(0)\, e^{4\kappa_m^2 t}$.

- Pour les valeurs propres du continuum, on utilise l'expression $g(\lambda, t) = (\psi S_x - \psi_x S)$ aux deux limites $\pm\infty$.
  Lorsque $x \to -\infty$, $\psi_k(t) = T(k,t)\, e^{-ikx}$ permet d'obtenir à partir de la définition (7.12) de S, l'égalité

$$S = \frac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}t} e^{-ikx} + 4ik^3 T\, e^{-ikx} \quad , \quad (7.27)$$

  qui donne $(\psi S_x - \psi_x S) = 0$ pour $x \to -\infty$, soit $g(\lambda, t) = 0$, ce qui indique que $(\psi S_x - \psi_x S) = 0$ pour tout x.
  En considérant maintenant cette équation lorsque $x \to +\infty$, où $\psi_k(x) = e^{-ikx} + R(k,t)\, e^{ikx}$, on obtient l'équation

$$2ik\frac{\mathrm{d}R}{\mathrm{d}t} + 16k^4 R = 0 \quad (7.28)$$

  qui démontre la seconde relation $R(k,t) = R(k,0)\, e^{i8k^3 t}$, et achève la démonstration du théorème.

7.1.4 Exemples d'applications

Avec les théorèmes 1 et 2, et l'équation de Gel'fand-Levitan-Marchenko (7.8), tous les éléments sont réunis pour répondre à la question de l'évolution d'un état initial dans l'équation de KdV.

1. On considère la condition initiale comme un potentiel pour une équation de Schrödinger dont on cherche :
   - les énergies des états liés $\lambda_m = -\kappa_m^2$;
   - le comportement à grande distance des états liés qui définissent les C_m ;
   - le coefficient de réflexion du potentiel pour les ondes planes $R(k,t)$.
2. Les théorèmes 1 et 2 permettent d'obtenir le comportement de ces données de diffusion à un instant t quelconque.
3. Enfin, l'équation de Gel'fand-Levitan-Marchenko (7.8) permet d'obtenir $u(x,t)$.

La solution de l'équation (7.8) est en général difficile à obtenir, mais il existe cependant un cas important où l'on peut avoir une solution exacte : c'est lorsque le noyau $B(z+y)$ est séparable, c'est-à-dire qu'il peut s'écrire sous la forme d'une combinaison linéaire de produits d'une fonction de z par une fonction de y. Si

$$B(z+y) = \sum_{m=1}^{N} F_m(z) G_m(y) \quad , \tag{7.29}$$

l'équation (7.9) s'écrit

$$K(x,y) + \sum_{m=1}^{N} F_m(x) G_m(y) + \sum_{m=1}^{N} G_m(y) \int_x^{+\infty} \mathrm{d}z \, F_m(z) K(x,z) = 0 \quad . \tag{7.30}$$

En cherchant des solutions sous la forme

$$K(x,y) = \sum_{m=1}^{N} L_m(x) G_m(y) \quad , \tag{7.31}$$

on obtient

$$\sum_{m=1}^{N} L_m(x) G_m(y) + \sum_{m=1}^{N} F_m(x) G_m(y) + \sum_{m=1}^{N} \sum_{p=1}^{N} G_m(y) L_p(x) \int_x^{+\infty} \mathrm{d}z \, F_m(z) G_p(z) = 0 \quad , \tag{7.32}$$

qui possède la solution

$$L_m(x) + F_m(x) + \sum_{p=1}^{N} L_p(x) \int_x^{+\infty} \mathrm{d}z \, F_m(z) G_p(z) = 0 \quad . \tag{7.33}$$

On aboutit par conséquent à un ensemble de N équations *algébriques* couplées pour les L_m, dans lesquelles x joue le rôle d'un simple paramètre.

Ce cas séparable sera obtenu pour tous les potentiels non réfléchissants (*i.e.* pour lesquels $R(k) = 0$) puisque, dans ce cas, l'expression (7.10) pour $B(\xi)$ se réduit à

$$B(\xi) = \sum_{m=1}^{N} C_m^2 \, e^{-\kappa_m \xi} \quad . \tag{7.34}$$

Cette situation se rencontre chaque fois que la condition initiale est une solution multisoliton. Dans ce cas, comme nous allons le voir sur des exemples, chaque valeur propre discrète λ_m correspond à un soliton dont l'amplitude et la position sont caractérisées par λ_m et C_m respectivement. L'utilisation de la méthode inverse permet alors facilement d'identifier les solitons présents dans la condition initiale et notamment d'extraire leur nombre, leur amplitude et leur position.

Condition initiale à un soliton

Nous savons que l'équation de KdV (7.1) admet comme solution soliton

$$u = -A \operatorname{sech}^2 \left[\sqrt{\frac{A}{2}} \, (x - 2At) \right] \quad , \tag{7.35}$$

en tenant compte du changement de variable $\phi = -u$ par rapport à l'équation (1.3).

Considérons par exemple la condition initiale $u(x, t = 0) = -2 \operatorname{sech}^2 x$, d'amplitude $A = 2$, qui conduit au problème linéaire associé :

$$\psi_{tt} + (2 \operatorname{sech}^2 x + \lambda) \psi = 0 \quad . \tag{7.36}$$

Nous retrouvons à nouveau l'équation de Schrödinger déjà rencontrée dans la cas de la perturbation des solitons de sine-Gordon (cf. équation (5.9)). Nous avons vu que, pour ce rapport particulier entre profondeur et largeur du puits, il n'existe qu'un seul état lié ($N = 1$). Il correspond au mode de Goldstone de l'équation de SG

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} \operatorname{sech} x \qquad \text{avec} \quad \lambda_1 = -1 \quad i.e. \quad \kappa_1 = 1 \quad . \tag{7.37}$$

Le comportement asymptotique $\psi(x) \sim \sqrt{2}\, e^{-x}$ détermine que $C_1(0) = \sqrt{2}$. Enfin, le potentiel étant non réfléchissant (cf. section 5.1), on peut utiliser l'expression (7.34). On en déduit par conséquent les relations suivantes :

$$\kappa_1 = 1 \quad , \qquad C_m(t) = \sqrt{2}\, e^{4t} \qquad \text{et} \qquad B(\xi) = 2\, e^{8t - \xi} \quad . \tag{7.38}$$

En définissant les deux fonctions F_1 et G_1 par $F_1(x) = \left(2\,e^{8t}\right) e^{-x}$ et $G_1(y) = e^{-y}$, on obtient $K(x, y) = e^{-y} L_1(x)$ où la fonction $L_1(x)$ vérifie l'équation

$$L_1(x) + 2\,e^{8t} e^{-x} + L_1(x) \int_x^{+\infty} \mathrm{d}z \; \left(2\,e^{8t}\right) e^{-z}\, e^{-z} = 0 \quad , \tag{7.39}$$

dont on déduit les expressions

$$L_1(x) = -\frac{2e^{8t - x}}{1 + e^{8t - 2x}} \quad \text{et} \quad K(x, y) = -2\frac{e^{8t - x - y}}{1 + e^{8t - 2x}} \quad . \tag{7.40}$$

La solution est enfin déduite de l'équation (7.8),

$$u(x, t) = -2\frac{\mathrm{d}K(x, x)}{\mathrm{d}x} \tag{7.41}$$

$$= -8\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} \frac{e^{8t - 2x}}{\left(1 + e^{8t - 2x}\right)^2} \tag{7.42}$$

$$= -2\,\mathrm{sech}^2(x - 4t) \tag{7.43}$$

qui est bien la solution à un soliton d'amplitude $A = 2$. On a ainsi vérifié sur cet exemple simple que la condition initiale $u(x, t = 0) = -2\,\mathrm{sech}^2\, x$ se propageait sans déformation et nous avons aussi déterminé sa vitesse.

Généralisation

On voit que le calcul est généralisable au cas de N solitons chaque fois que le potentiel est non réfléchissant. Il faut résoudre alors le système (7.33) de N équations à N inconnues pour déterminer les fonctions $L_m(x)$.

La condition initiale $u(x, 0) = -6\,\mathrm{sech}^2\, x$ est un autre cas pour lequel le calcul analytique est encore assez facile. Dans ce cas, le potentiel de l'équation de Schrödinger associée est plus profond comparativement à sa largeur que dans le cas précédent. Le potentiel possède deux états liés, et il en résulte que c'est une solution à deux solitons qui s'écrit :

$$u(x, t) = -12\frac{2 + 4\cosh(2x + 24t) + \cosh(4x)}{\left[3\cosh(x - 12t) + \cosh(3x + 12t)\right]^2} \quad . \tag{7.44}$$

La résolution de l'équation de Schrödinger se fait en remarquant que la condition initiale donne le même potentiel que celui qui est associé aux petites oscillations autour du soliton ϕ^4 (cf. équation (5.43)), dont on avait vu qu'il avait deux états liés, qui, pour le soliton du modèle ϕ^4, donnaient le mode de Goldstone et le mode interne.

D'une manière générale, les expressions asymptotiques des solutions à N solitons sont des fonctions des variables $\xi_m = x - x_0 - 4\kappa_m^2 t$, $m = 1 \ldots N$. Les valeurs propres discrètes $\kappa_m^2 = -\lambda_m$ déterminent les vitesses, et par conséquent les amplitudes des solitons, alors que les paramètres $C_m^2(0)$ déterminent

les positions respectives des solitons composant la solution à N solitons. C'est ainsi qu'ont pu être construites de manière systématique les solutions à N solitons de l'équation de KdV en faisant l'hypothèse de potentiel non réfléchissant et en se donnant des conditions initiales pour $C_m(0)$ et κ_m [4, 61] .

Le calcul dans le cas réfléchissant est rarement possible explicitement, mais il est en général inutile. En effet, à partir de l'état initial, la recherche des états liés du potentiel $u(x, 0)$ donne le *contenu en solitons de la condition initiale.* On peut ensuite déterminer l'évolution ultérieure de ces solitons en négligeant la contribution des oscillations de petite amplitude qui vont se disperser dans le système.

La méthode inverse peut par conséquent être utilisée comme un véritable « détecteur de solitons ». Elle permet, par exemple, d'expliquer immédiatement et sans calcul pourquoi une solution en creux de l'équation de KdV ne donne jamais de soliton comme nous l'avons déjà vu dans le chapitre 1. En effet, cette condition où ϕ serait négative, donnerait un potentiel toujours positif $u = -\phi$, qui ne peut avoir d'états liés.

7.2 La méthode inverse : une « analyse de Fourier » pour les problèmes non-linéaires

La méthode inverse apparaît comme l'analogue d'une analyse de Fourier pour les problèmes *non-linéaires.* Considérons en effet l'utilisation de la transformée de Fourier pour résoudre une équation linéaire aux dérivées partielles, telle que, par exemple, une linéarisation de l'équation de KdV :

$$u_t + \alpha u_x + u_{xxx} = 0 \quad . \tag{7.45}$$

À partir de la donnée d'une condition initiale $u(x, t = 0)$, la méthode consiste à calculer son spectre en prenant sa transformée de Fourier, qui détermine l'importance de chaque composante de vecteur d'onde k dans la condition initiale par

$$\widetilde{U}(k) = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}x\, u(x, 0)\, e^{-ikx} \quad . \tag{7.46}$$

Ensuite, on connaît l'évolution de chaque composante à partir des solutions $u_0 e^{i[kx-\omega(k)t]}$ de l'équation linéaire, qui détermine la relation de dispersion $\omega(k) = \alpha k - k^3$.

On peut donc reconstituer la solution à un instant quelconque à partir de la formule suivante :

$$u(x, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}k\, \widetilde{U}(k)\, e^{i[kx-\omega(k)t]} \quad . \tag{7.47}$$

La clé du fonctionnement de la méthode est la séparabilité de l'évolution des composantes de vecteurs d'onde différents. Cela permet de calculer leur évolution temporelle sans connaître la solution $u(x,t)$ *a priori*.

Pour l'équation non-linéaire de KdV, la démarche de la méthode inverse est tout à fait analogue puisque le spectre de la condition initiale est constitué par les données de diffusion (λ_m, $C_m(t)$, $R(k,t)$). Leur calcul correspond à la transformée de Fourier directe. L'évolution de chaque composante selon l'équation de KdV est obtenue à partir des théorèmes 1 et 2, de même que l'équation linéaire détermine le spectre $\omega(k)$. Comme pour l'équation linéaire, le point important est que l'on puisse calculer l'évolution des données de diffusion sans connaître explicitement la solution $u(x,t)$ à tout instant, puisque chacune de ces données évolue indépendamment des autres. Ensuite, on reconstitue la solution $u(x,t)$ à un instant quelconque à partir de l'équation de Gel'fand-Levitan-Marchenko qui correspond à la transformée de Fourier inverse (7.47).

Dans cette analyse, les solitons apparaissent par conséquent comme les *modes normaux non-linéaires* du système. La méthode inverse est une méthode très systématique de détermination de l'évolution d'une condition initiale de KdV. Elle a, par exemple, été utilisée [118] pour analyser les solitons se propageant sous la forme d'ondes internes de la mer d'Andaman (cf. section 1.6).

Elle peut servir non seulement à déterminer l'évolution d'une condition initiale, mais aussi à générer les solutions à N solitons comme nous l'avons indiqué ainsi, que pour obtenir une infinité de lois de conservation qui montrent que l'équation de KdV correspond à un système à nombre infini de degrés de liberté *totalement intégrable*. Cependant, l'inconvénient majeur de cette méthode est qu'elle n'est pas généralisable à toutes les équations non-linéaires et qu'en outre, contrairement à la transformée de Fourier pour les équations linéaires, elle est *spécifique* à chaque équation à laquelle elle s'applique, puisque le problème linéaire associé dépend de l'équation considérée.

7.2.1 Une étape de la généralisation : la méthode de Lax

La méthode de Lax [91] met le formalisme de la méthode inverse sous une forme beaucoup plus générale que celle que nous avons donnée pour l'équation de KdV. Supposons en effet que l'on désire résoudre l'équation non-linéaire $u_t = N(u)$ où N est un opérateur non-linéaire indépendant de la variable t, mais qui peut contenir la variable spatiale x et des dérivées par rapport à cette variable.

Le principe de la méthode de Lax consiste à réécrire l'équation sous la forme d'une équation entre opérateurs qui agissent dans un espace de Hilbert $\mathcal{H}$, différent de l'espace fonctionnel $\mathcal{E}$ dans lequel on résout l'équation différentielle.

On écrit l'équation sous la forme

$$L_t - [M, L] = 0 \tag{7.48}$$

où L et M sont des opérateurs linéaires sur $\mathcal{H}$ qui peuvent dépendre de u ; dans le cas de l'équation de KdV, l'opérateur L est $L = -\partial_{xx} + u(x,t)$, alors que M sera précisé ultérieurement. Enfin $[M, L] = ML - LM$ et L_t correspond à la dérivée des expressions dans laquelle le temps apparaît de manière explicite. Ainsi, dans le cas de KdV, $L_t = u_t$.

L'espace de Hilbert est muni d'un produit scalaire que nous noterons $\langle\phi|\psi\rangle$ où ϕ et ψ sont deux éléments de $\mathcal{H}$. L'opérateur L est auto-adjoint, c'est-à-dire que l'on a $\langle\phi|L\psi\rangle = \langle L\phi|\psi\rangle$ pour tous les éléments ϕ et ψ de l'espace de Hilbert $\mathcal{H}$.

Dans le même esprit que dans la partie précédente, on associe le problème linéaire

$$L\,\psi = \lambda\,\psi \tag{7.49}$$

à l'équation non-linéaire, où la valeur propre λ est un scalaire. Montrons que, si les opérateurs L et M sont liés par l'équation (7.48), alors les valeurs propres λ sont indépendantes de la variable t. Pour cela, dérivons l'équation (7.49) par rapport au temps

$$L_t\psi + L\psi_t = \lambda_t\psi + \lambda\psi_t \tag{7.50}$$

$$(ML - LM)\psi + L\psi_t = \lambda_t\psi + \lambda\psi_t \quad . \tag{7.51}$$

En réorganisant les termes, on a

$$\lambda_t\psi = M\underbrace{L\psi}_{\lambda\psi} - LM\psi + (L-\lambda)\psi_t \quad , \tag{7.52}$$

ou encore

$$\lambda_t\psi = (L-\lambda)\,(\psi_t - M\psi) \quad . \tag{7.53}$$

En faisant le produit scalaire par ψ et en utilisant le fait qu'il est linéaire, on obtient finalement

$$\langle\psi|\lambda_t\psi\rangle = \lambda_t\langle\psi|\psi\rangle = \langle\psi|(L-\lambda)\,(\psi_t - M\psi)\rangle \tag{7.54}$$

$$= \langle\underbrace{(L-\lambda)\psi}_{=0}\,|\,(\psi_t - M\psi)\rangle \tag{7.55}$$

puisque l'opérateur L est auto-adjoint, de même que le produit par la valeur propre réelle λ. Par conséquent, à moins que $\langle\psi|\psi\rangle$ ne soit identiquement nul, ce qui signifierait que $\psi = 0$ d'après les propriétés du produit scalaire, on obtient que $\lambda_t = 0$.

La relation (7.53) implique alors que $(L-\lambda)\,(\psi_t - M\psi) = 0$, ce qui signifie que $(\psi_t - M\psi)$ est une fonction propre de l'opérateur L, associée à la même

valeur propre λ. Comme cette valeur propre n'est pas dégénérée, on en déduit qu'il existe une constante C telle que

$$(\psi_t - M\psi) = C\psi \tag{7.56}$$

c'est-à-dire que $\psi_t = M'\psi$ en posant $M' = M + C$. Cependant, comme C est une constante, L et C commutent, d'où $[M, L] = [M', L]$. On en déduit que, si la paire (L, M) vérifie l'équation (7.48), la paire (L, M') la vérifie également.

On peut, par conséquent, trouver une paire d'opérateurs (L, M), dite *paire de Lax*, telle que

$$L_t - [M, L] = 0 \quad . \tag{7.57}$$

$$\text{Si} \qquad L\psi = \lambda\psi \quad \text{alors} \quad \lambda_t = 0 \quad \text{et} \qquad \psi_t = M\psi \quad . \tag{7.58}$$

Dans la démarche que nous venons de suivre, on reconnaît les étapes que nous avons détaillées pour l'équation de KdV mais avec un formalisme plus compact et donc plus aisément généralisable. Si l'on se donne $L = -\partial_{xx} + u(x,t)$ pour que le problème linéaire associé $L\psi = \lambda\psi$ corresponde à une équation de Schrödinger dont on puisse reconstruire le potentiel à partir de l'équation de Gel'fand-Levitan-Marchenko, il faut encore déterminer l'opérateur M pour que l'équation (7.48) conduise à l'équation non-linéaire que l'on cherche à résoudre.

Le plus simple serait de prendre, $M = c\partial_x - I$, où I est l'opérateur identité, qui conduirait à $[L, M] = (-cu_x\cdot)$. L'équation (7.48) conduit alors à $u_t + cu_x = 0$, l'équation linéaire de propagation des ondes. Ce choix n'est donc pas intéressant car il mène à une équation trop simple. Il faut chercher un opérateur plus compliqué.

L'opérateur $M = c\partial_{xx}$ conduirait à $[L, M] = -c\,(u_{xx}\cdot \; + u_x\partial_x)$. Comme ce dernier ne se réduit pas à un opérateur multiplicatif, l'équation (7.48) ne conduit pas à une équation aux dérivées partielles en u. Cela montre que le choix de l'opérateur M n'est pas libre. Il doit être tel que $[L, M]$ se réduise à un opérateur multiplicatif mais, de plus, il doit aboutir à une équation intéressante !

L'analyse montre que l'on doit choisir un opérateur différentiel d'ordre impair, comportant suffisamment de paramètres libres. Ainsi, on peut vérifier que le choix

$$M = -4\frac{\partial^3}{\partial x^3} + u\frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x}u \tag{7.59}$$

permet d'obtenir l'équation de KdV.

Cette méthode ouvre la porte à toute une généralisation de la méthode d'inversion des données de diffusion telle qu'elle avait été initialement introduite pour l'équation de KdV car elle permet de construire toute une hiérarchie d'équations en choisissant des opérateurs M de plus en plus compliqués. La méthode assure en outre que ces équations correspondent à des systèmes

totalement intégrables ayant des solutions solitons exacts. Ainsi, celle qui suit l'équation de KdV dans la hiérarchie est

$$u_t + 30u^2 u_x - 20uu_x - 10uu_{xxx} + u_{xxxxx} = 0 \quad . \tag{7.60}$$

La grande richesse de la méthode de Lax résulte dans des possibilités de généralisation encore plus larges. En effet, la séparation entre l'espace $\mathcal{E}$ dans lequel on résout l'équation et l'espace $\mathcal{H}$ du problème associé, permet d'étendre le second, et en particulier de choisir des opérateurs *matriciels* pour L et M.

7.2.2 La méthode (AKNS) Ablowitz-Kaup-Newell-Segur

Deux schémas de généralisation ont été proposés au delà de la méthode de Lax. En 1971, V. Zakharov et V. Shabat ont introduit [161] une méthode matricielle qui permet de résoudre l'équation de NLS. En 1974, M. Ablowitz, D. Kaup, A. Newell et H. Segur (AKNS) ont proposé [12] à leur tour un schéma qui part d'un opérateur matriciel (2×2) et permet de traiter toute une variété de systèmes non-linéaires totalement intégrables par la méthode inverse : Korteweg-de-Vries, sine-Gordon, Schrödinger non-linéaire, etc.

L'étude de ces généralisations dépasse le cadre de cet ouvrage mais nous allons cependant présenter quelques idées sur le schéma AKNS que l'on pourra approfondir en utilisant l'article original [12] ou bien le livre [4] qui le complète bien.

Considérons l'opérateur linéaire dépendant de deux fonctions $q(x,t)$ et $r(x,t)$

$$L = \begin{pmatrix} \partial_x & -q(x,t) \\ r(x,t) & -\partial_x \end{pmatrix} \tag{7.61}$$

qui agit sur un espace dont les éléments $\psi(x) = (\psi_1(x), \psi_2(x))$ sont des ensembles de deux fonctions de la variable x. Les valeurs propres ζ de l'opérateur L sont définies de la manière suivante :

$$L\psi = -i\zeta\psi \quad . \tag{7.62}$$

Le point important est que l'on *impose* que les valeurs propres ζ soient indépendantes de t et que les fonctions propres en dépendent selon la loi

$$\psi_t = M\psi \quad , \tag{7.63}$$

où M est un opérateur linéaire agissant sur le même espace. On reconnaît donc la paire de Lax (L, M), alors que les fonctions ψ sont appelées *fonctions de Jost*.

La compatibilité des deux équations (7.61) et (7.62) limite les choix pour l'opérateur M. En effet, on peut réécrire l'équation (7.62) sous la forme

$$\frac{\partial\psi}{\partial x} = R\psi \qquad \text{avec} \qquad R = \begin{pmatrix} -i\zeta & q \\ r & i\zeta \end{pmatrix} \quad . \tag{7.64}$$

Pour avoir compatibilité entre $\psi_x = R\psi$ et $\psi_t = M\psi$, il faut que les deux conditions suivantes soient vérifiées :

$$\psi_{xt} = R_t\psi + R\psi_t = R_t\psi + RM\psi \tag{7.65}$$

et

$$\psi_{tx} = M_x\psi + M\psi_x = M_x\psi + MR\psi \quad . \tag{7.66}$$

Cela impose la condition

$$R_t - M_x - [M, R] = 0 \tag{7.67}$$

qui généralise l'équation (7.48) que nous avions écrite pour la méthode de Lax. En établissant des relations sur les fonctions $q(x,t)$ et $r(x,t)$, cette équation définit en fait les équations non-linéaires que l'on peut résoudre par cette technique.

Il reste néanmoins à définir les données de diffusion et la façon dont on les inverse. Les données de diffusion sont obtenues en considérant le comportement de ψ lorsque $|x|$ tend vers l'infini. Comme dans le cas de KdV, on cherche des équations ayant des solutions localisées et on considère, par conséquent, les cas où les fonctions q et r tendent vers zéro lorsque $|x|$ tend vers l'infini. Dans cette limite, L se réduit donc à

$$L \simeq \begin{pmatrix} \partial_x & 0 \\ 0 & -\partial_x \end{pmatrix} \quad . \tag{7.68}$$

Cela permet de déterminer aisément les solutions de l'équation (7.62) en $\pm\infty$, notées $\psi_\pm$:

$$\psi_+(x;\zeta) \simeq e^{-i\zeta x}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi_{1+} \\ \psi_{2+} \end{pmatrix} \text{ et } \psi'_+(x;\zeta) \simeq e^{i\zeta x}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi'_{1+} \\ \psi'_{2+} \end{pmatrix} \tag{7.69}$$

$$\psi_-(x;\zeta) \simeq e^{-i\zeta x}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi_{1-} \\ \psi_{2-} \end{pmatrix} \text{ et } \psi'_+(x;\zeta) \simeq e^{i\zeta x}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi'_{1-} \\ \psi'_{2-} \end{pmatrix} \quad . \tag{7.70}$$

Ces solutions ne sont cependant pas indépendantes puisqu'elles sont reliées par l'équation (7.62) pour toutes les valeurs de x. Cela signifie que, si l'on considère une solution qui tend vers ψ_+ lorsque x tend vers $+\infty$, elle sera en général une combinaison des quatre solutions $\psi_{1\pm}$, $\psi_{2\pm}$, pour x tendant vers $-\infty$.

Si l'on met sous forme matricielle les fonctions aux deux limites, il vient

$$\Psi_+ = \begin{pmatrix} \psi_{1+} & \psi'_{1+} \\ \psi_{2+} & \psi'_{2+} \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad \Psi_- = \begin{pmatrix} \psi_{1-} & \psi'_{1-} \\ \psi_{2-} & \psi'_{2-} \end{pmatrix} \quad ; \tag{7.71}$$

il existe donc une matrice S, appelée matrice de diffusion, reliant ces deux matrices, par la relation $\Psi_- = S\,\Psi_+$. Elle généralise les coefficients C_m, $R(k)$ de l'équation de KdV et, là encore, on trouve généralement deux types de valeurs propres ζ, et donc de matrices $S(\zeta)$. Les valeurs propres discrètes correspondent toujours aux solitons, alors que celles appartenant au spectre continu correspondent aux radiations.

L'étude montre, en outre, que les évolutions des données de diffusion restent non seulement toujours très simples, mais surtout indépendantes de l'expression complète des fonctions $r(x,t)$ et $q(x,t)$: c'est essentiel pour assurer le succès de cette méthode. Ces deux fonctions peuvent enfin être obtenues par une équation de Gel'fand-Levitan-Marchenko matricielle (matrice 2×2) formellement identique à celle que nous avons donnée pour KdV et dont le noyau B s'obtient encore à partir des données de diffusion $S(\zeta)$.

Ce schéma, très général, s'applique à une grande variété de systèmes intégrables. Ainsi, pour obtenir par exemple l'équation de NLS, sous la forme

$$iu_t + u_{xx} + 2|u|^2u = 0 \quad , \tag{7.72}$$

on utilise la matrice

$$L = \begin{pmatrix} \partial_x & iu^*(x,t) \\ -iu(x,t) & -\partial_x \end{pmatrix} \tag{7.73}$$

mais l'expression de l'opérateur M est compliquée [83].

7.2.3 La méthode inverse et la théorie des perturbations

Nous venons de voir que la méthode inverse s'étend bien au delà du cadre de l'équation de KdV, pour lequel elle a été initialement proposée. On peut par conséquent envisager son application pour analyser les propriétés de nombreux systèmes physiques et en particulier en tant que « détecteur de solitons » dans le traitement des données expérimentales ou numériques.

Cependant, comme nous l'avons vu, il est rare qu'un système physique soit décrit exactement par une équation totalement intégrable. En général, son équation d'évolution contient des termes supplémentaires, souvent petits mais de grande importance physique car ils représentent justement la déviation par rapport à l'intégrabilité.

L'intérêt de la méthode inverse est qu'elle permet justement de calculer l'influence de ces perturbations. On peut illustrer ceci sur un exemple simple en considérant l'équation de KdV perturbée suivante :

$$u_t - 6uu_x + u_{xxx} = \varepsilon P(x,t) \quad , \tag{7.74}$$

où la perturbation peut être prise de la forme, $P(x,t) = \gamma(t)u(x,t)$ si l'on souhaite étudier par exemple, la propagation de vagues en eau de profondeur variable [83].

En reprenant les calculs présentés pour l'équation de KdV, on peut s'assurer que l'équation (7.13) était obtenue *via* l'expression

$$\psi^2\,(\lambda_t - u_t + 6uu_x - u_{xxx}) = -(\psi S_x - \psi_x S)_x \quad , \tag{7.75}$$

dans laquelle l'équation de KdV avait été utilisée pour annuler le terme dépendant de u dans le membre de gauche.

En présence de la perturbation, on obtient par conséquent l'équation suivante pour la valeur propre λ_m :

$$\psi_m^2\,(\lambda_{mt} - \varepsilon P(x,t)) = -(\psi_m S_{mx} - \psi_{mx} S_m)_x \quad . \tag{7.76}$$

Comme précédemment, on intègre spatialement, et on utilise le fait que la fonction d'onde ψ_m, correspondant aux valeurs propres discrètes, est de norme unité, et que ψ_m et S_m tendent vers zéro à l'infini. On obtient ainsi

$$\lambda_{mt} - \varepsilon \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_m^2\, P(x,t)\,\mathrm{d}x = 0 \quad . \tag{7.77}$$

Puisque λ_{mt} n'est plus nul, les valeurs propres varient lentement dans le temps. En outre, comme elles correspondent à l'amplitude et à la vitesse du soliton, on pourra en déduire la façon dont un soliton réagit à la perturbation.

Cet exemple montre que la méthode inverse peut être une méthode puissante pour étudier les perturbations des solitons. Le lecteur intéressé pourra se référer à l'article [83] extrêmement copieux sur ce sujet.

Troisième partie

Exemples en physique des solides

Avant-propos

DANS LA PREMIÈRE PARTIE DE CET OUVRAGE, nous avons examiné des exemples de solitons *macroscopiques*. En hydrodynamique ou dans les lignes électriques non-linéaires, il est facile de se convaincre de la présence des solitons puisqu'on les voit ou qu'on visualise leur potentiel électrique sur l'écran d'un oscilloscope. Dans les fibres optiques, l'observation demande plus de matériel, mais la détection des solitons individuels reste possible. De même, dans les jonctions Josephson, on a une preuve très directe de l'existence des solitons par leur signature dans la caractéristique courant–tension ou l'émission micro-onde associée à leurs aller–retour dans la jonction.

Dans le cadre de la physique *microscopique*, comme la physique des solides ou des macromolécules, on ne peut pas faire d'observations individuelles des solitons. On ne peut les mettre en évidence que par leurs conséquences sur les propriétés des matériaux, telles que les propriétés diélectriques, ou leur influence sur la diffusion de la lumière et des neutrons, sur le spectre RMN, sur les niveaux d'énergie électronique détectés par spectroscopie d'absorption de la lumière par exemple. Par conséquent, au niveau microscopique, la notion de soliton est plus controversée. Très souvent, d'ailleurs, on ne s'attend pas à de véritables solitons possédant toutes les propriétés, si particulières, décrites dans la première partie (stabilité et résistance aux collisions) mais à des quasi-solitons comme nous le verrons, par exemple, à propos des dislocations.

Cependant, la notion de soliton fournit souvent une première description très utile pour comprendre certaines propriétés physiques des solides ou des macromolécules. Dans les troisième et quatrième parties, nous allons considérer quelques exemples dans un ordre croissant de complexité :

- *Solitons et déplacements atomiques dans les solides* qui peuvent être analysés convenablement à l'aide de la mécanique classique.
- *Solitons et propriétés magnétiques*, c'est un exemple où le modèle de soliton est particulièrement bien adapté et peut être très bien testé expérimentalement. On doit partir d'une description quantique, mais on peut se ramener à un traitement quasi-classique.
- *Solitons et dynamique du transport de charge dans les polymères conducteurs*, qui permet de présenter un exemple où la coopération entre

théoriciens et expérimentateurs a été très fructueuse. La description quantique est indispensable à ce niveau.

Solitons dans les macromolécules biologiques, c'est un domaine encore controversé, mais les modèles de solitons, bien qu'ils soient très simplifiés par rapport à la complexité de ces systèmes biologiques, donnent des résultats intéressants sur le transfert d'énergie dans les protéines ou la dynamique de l'ADN.

Chapitre 8

Le problème de Fermi-Pasta-Ulam

AVANT DE CONSIDÉRER des applications plus spécifiques de la physique des solides réels, il est intéressant de présenter ce problème de dynamique des réseaux atomiques non-linéaires car c'est celui qui est à l'origine de la « redécouverte » du concept de soliton par Zabusky et Kruskal en 1965.

Le « problème FPU », qui porte le nom des scientifiques qui en sont à l'origine, E. Fermi, J. Pasta et S. Ulam[1], est parti de la simulation numérique d'un réseau faiblement non-linéaire pour étudier la thermalisation d'un solide [55]. Comme l'a révélé ultérieurement Ulam [148], ces auteurs cherchaient à formuler un problème en physique théorique qui permettrait d'utiliser l'un des tous premiers ordinateurs, « Le Maniac ». Ce travail, publié en 1955 dans un rapport du laboratoire de Los Alamos, a été effectué juste avant la mort d'Enrico Fermi en 1954. Ulam révéla par la suite que Fermi ne soupçonnait pas l'étendue de sa découverte, puisqu'il considérait ce travail comme une « découverte mineure ». Il avait néanmoins l'intention de présenter ce travail à la conférence de la Société américaine de mathématiques à laquelle il était invité, juste avant de tomber gravement malade.

Fermi, Pasta et Ulam décidèrent d'étudier la façon dont un cristal évolue vers l'équilibre thermique à partir de la simulation numérique de la dynamique d'une chaîne de particules de masse unité, liées par un potentiel quadratique mais aussi par une faible interaction non-linéaire. Le problème est décrit par l'hamiltonien

$$H = \sum_{i=0}^{N-1} \frac{1}{2} p_i^2 + \sum_{i=0}^{N-1} \frac{1}{2} K (u_{i+1} - u_i)^2 + \frac{K\alpha}{3} \sum_{0}^{N-1} (u_{i+1} - u_i)^3 \quad , \qquad (8.1)$$

où u_i est le déplacement de l'atome i, supposé être dans la direction de la chaîne et p_i la quantité de mouvement correspondante. Le coefficient $\alpha \ll 1$ mesure l'importance du terme non-linéaire dans le potentiel d'interaction. La chaîne avait des extrémités supposées fixes, *i.e.* $u_0 = u_N = 0$.

1. Mary Tsingou bien qu'ayant participé au travail numérique n'est pas auteur du rapport, mais a néanmoins droit à deux lignes de remerciements !



Né à Rome, ENRICO FERMI (1901-1954) a été l'un des plus brillants physiciens du XXe siècle, avec des contributions majeures, tant expérimentales que théoriques. Son nom restera fameux pour ses contributions à la physique statistique, à la maîtrise de l'énergie nucléaire, à la physique des particules élémentaires, etc. C'est à la faveur d'un voyage en Suède en 1938 pour recevoir le prix Nobel, qu'il quitta l'Italie fasciste pour les États-Unis. Il travailla sur des problèmes relatifs à la fission et mit au point la première réaction en chaîne contrôlée à Chicago en 1942. Cela le conduisit tout naturellement à être l'un des *leaders* du projet Manhattan pour le développement de l'énergie nucléaire et de la bombe atomique. Il est cependant moins connu qu'à la fin de sa vie, il s'est intéressé à plusieurs problèmes non-linéaires, avant de mourir prématurément d'un cancer de l'estomac... (Photographie AIP Emilio Segré Visual Archives, Segré Collection).



JOHN R. PASTA (1918-1981) n'eut pas une carrière aussi rapide. Bien qu'intéressé par la physique, il quitta le *City College* de New York pendant la dépression pour occuper plusieurs emplois : il fut tout d'abord expert en biens immobiliers avant d'être officier de police à New York de 1941 à 1942. Il fut ensuite recruté dans l'armée américaine pendant la Seconde Guerre mondiale. John R. Pasta était spécialiste en cryptographie et radar. Son salaire de GI lui permit de retourner à l'université où il obtint un doctorat en physique théorique en 1951. Il commença immédiatement à travailler à Los Alamos sur le MANIAC (Mathematical Analyzer, Numerical Integrator And Computer), l'ordinateur qui était en fin de construction et de tests.

Il poursuivit sa carrière en tant qu'expert en ordinateur à la commission pour l'énergie atomique, où il développa, de manière très importante, la division pour les mathématiques et les ordinateurs. John R. Pasta devint ensuite professeur de physique puis, en 1964, directeur du département d'informatique de l'université d'Illinois, où il s'attacha à utiliser l'ordinateur pour résoudre des problèmes appliqués en physique et de mathématiques (Photographie Department of Computer Science at the University of Illinois).



Né en Pologne, STANISLAW M. ULAM (1909-1984) s'intéressa très tôt aux mathématiques et obtint sa thèse en 1933 sous la direction de Banach (1892-1945). À la suite d'une première invitation par Von Neumann au fameux *Institut for Advanced Study* de Princeton en 1935, il effectua plusieurs séjours aux États-Unis avant de quitter définitivement la Pologne un mois avant le déclenchement de la seconde guerre mondiale. Il devint citoyen américain en 1943 et von Neumann lui demanda de se joindre à l'équipe regroupée à Los Alamos pour préparer la bombe atomique : il résolut notamment le problème de l'initiation de la fusion de la bombe à hydrogène. En collaboration avec N.C. Metropolis, il inventa aussi la méthode Monte-Carlo pour résoudre les problèmes nécessitant un échantillonnage statistique. Il resta au Nouveau Mexique jusqu'en 1965 avant d'être nommé professeur de mathématiques à l'université du Colorado (Photographie AIP Emilio Segré Visual Archives, Ulam Collection).

L'expérience numérique de FPU fut effectuée sur le MANIAC qui fut construit en 1952 dans le cadre du projet Manhattan et qui servit notamment pour mettre au point Mike, la première bombe à hydrogène. Il fut développé à la suite de la frustration de Richard Feynman (1918-1987) et Nicholas C. Metropolis (1915-1999), exaspérés par les appareils électromécaniques, lents, bruyants mais pourtant indispensables pour les calculs nécessaires au développement des bombes. Pour la petite histoire, le directeur du projet, Metropolis, aurait choisit le nom de MANIAC en espérant mettre fin à la mode naissante de nommer les ordinateurs par des acronymes : cela eut pourtant l'effet totalement inverse. Cet ordinateur effectuait de l'ordre de 10^4 opérations par seconde environ, qu'il faut mettre en rapport avec les 10^8 opérations effectuées par le moindre ordinateur personnel de nos jours.

C'est Fermi qui eut l'idée géniale que l'on pouvait utiliser des ordinateurs pour étudier un problème ou une idée physique. C'est lui qui choisit de vérifier les prédictions de la mécanique statistique sur ce système qui porte désormais le nom de FPU. Cette découverte est non seulement à l'origine de la compréhension du concept de solitons et de nombreuses caractéristiques des phénomènes chaotiques mais elle correspond surtout à l'invention du *concept d'expérience numérique*. Ceci a provoqué une révolution complète de l'approche de certains phénomènes physiques puisque l'on peut désormais étudier des phénomènes comme les collisions de trous noirs ou les phénomènes quantiques hors d'atteinte des expériences ou travaux analytiques.

La découverte remarquable de FPU eut lieu en 1953, la même année que la découverte de la structure en double hélice de l'ADN par J.D. Watson et F. Crick qui a tant modifié l'approche moléculaire de la biologie. Incidemment, il n'est pas inutile de rappeler que les simulations numériques de FPU étaient effectuées par Mary Tsingou qui n'est pas auteur de l'article. Une coïncidence étonnante puisque la contribution expérimentale de Rosalind Franklin (1920-1958) fut totalement minimisée dans le cas de la double hélice [50] ! Fermi, qui qualifia cette découverte de « mineure », avait l'intention de présenter ces résultats dans une conférence honorifique de la Société américaine de mathématiques. Il tomba cependant malade avant la conférence. Ce travail resta plusieurs années un rapport de Los Alamos, classé Secret-défense, et c'est finalement Ulam qui fit connaître les résultats à la communauté scientifique à l'occasion de plusieurs conférences.

L'approche habituelle en physique est de raisonner à l'aide des « modes normaux » qui sont liés aux déplacements par $A_k = \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_{i=0}^{N-1} u_i \sin(ik\pi/N)$ et dont la pulsation est $\omega_k^2 = 4K \sin^2(k\pi/2N)$. On peut alors réécrire l'hamiltonien (8.1) sous la forme

$$H = \frac{1}{2} \sum_k \left(\dot{A}_k^2 + \omega_k^2 A_k^2 \right) + \alpha \sum_{k,\ell,m} c_{k\ell m} A_k A_\ell A_m \quad . \tag{8.2}$$

Le dernier terme, provenant directement de la partie non-linéaire du potentiel, correspond au couplage des différents modes.

Fermi, Pasta et Ulam considéraient qu'en présence de ce terme, si l'on introduisait de l'énergie dans un seul mode, $k = 1$ en l'occurrence, elle se répartirait progressivement sur les différents modes afin que l'on atteigne l'équipartition de l'énergie entre les modes. C'est effectivement ce que suggéraient les résultats au début du calcul, puisque les modes 2, 3, etc. étaient successivement excités. Cependant, à leur grande surprise, après 157 périodes du fondamental, la quasi totalité de l'énergie (à 3 % près) revenait dans le fondamental comme le montre la figure 8.1.

L'état initial semble être presque complètement reconstitué après cette période de récurrence. Des calculs ultérieurs ont mis en évidence que ce phénomène se répétait un grand nombre de fois et qu'il existait même une période de « super-récurrence » au bout de laquelle l'état initial était encore mieux reconstitué. Contrairement à ce que les auteurs attendaient, il n'y avait donc pas de transfert régulier et continu de l'énergie du mode 1, excité initialement, vers les modes de plus grands nombres d'ondes.

Ce résultat tout à fait remarquable, connu sous le nom de paradoxe de FPU, montre que l'introduction de la non-linéarité dans un système ne garantit pas l'équipartition de l'énergie. Mais, pour mieux le comprendre, il faut abandonner la notion de modes normaux linéaires du système et considérer le système totalement non-linéaire. Il faut, en outre, cesser de raisonner dans l'espace de Fourier et revenir à l'espace réel : un « mode » correspond à une

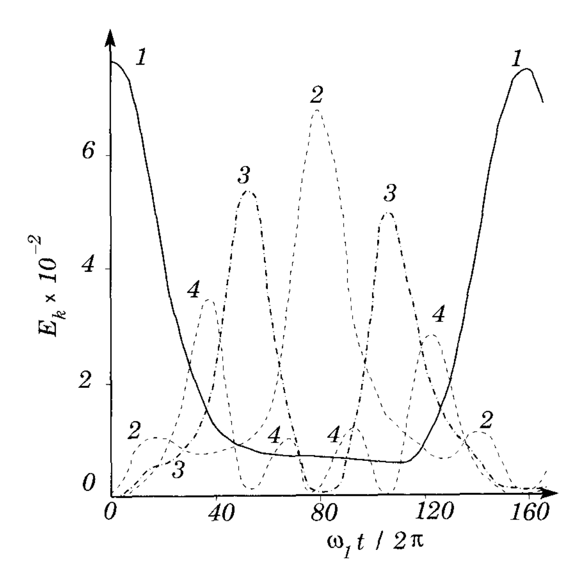


FIG. 8.1 – Récurrence de FPU : La figure présente l'évolution en fonction du temps de l'énergie cinétique et potentielle $E_k = \frac{1}{2}\left(\dot{A}_k^2 + \omega_k^2 A_k^2\right)$ de chacun des cinq premiers modes normaux. Initialement seul le mode 1 était excité (d'après la référence [55]).

excitation localisée de l'espace de Fourier mais délocalisée dans l'espace réel, alors qu'un soliton est un mode localisé dans l'espace réel mais délocalisé dans l'espace de Fourier.

La solution du paradoxe de FPU a été apportée dix ans plus tard par Zabusky et Kruskal en termes de solitons [160]. Ils ont considéré les équations du mouvement correspondant à l'hamiltonien (8.1)

$$\ddot{u}_i = K(u_{i+1} + u_{i-1} - 2u_i) + K\alpha\left[(u_{i+1} - u_i)^2 - (u_i - u_{i-1})^2\right] \quad . \quad (8.3)$$

Cherchons des solutions de faible amplitude par rapport au paramètre de maille que nous noterons a. On pose pour cela $u = a\varepsilon v$ avec $\varepsilon \ll 1$. En divisant l'équation par εa, on obtient

$$\ddot{v}_i = \frac{c^2}{a^2}(v_{i+1} + v_{i-1} - 2v_i) + \frac{c^2\alpha\varepsilon}{a}\left[(v_{i+1} - v_i)^2 - (v_i - v_{i-1})^2\right] \quad , \quad (8.4)$$

en introduisant la vitesse du son dans le système $c = a\sqrt{K}$.

Fermi, Pasta et Ulam s'intéressaient aux modes de faibles vecteurs d'ondes puisqu'ils excitaient le mode de vecteur d'onde $k = 1$, dont la longueur d'onde correspond au double de la taille du système. Comme, en outre, les simulations numériques révèlent que la récurrence intervient avant que les modes d'ordre élevé n'aient été excités, on peut se contenter de décrire les modes de

grande longueur d'onde, c'est-à-dire traiter le problème dans l'approximation des milieux continus. On introduit ainsi la variable sans dimension $X = \varepsilon x/a$, où le facteur $\varepsilon \ll 1$ traduit l'hypothèse de variation spatiale lente de v quand x, variable d'espace le long de la chaîne, varie de a. Pour estimer les ordres de grandeurs, introduisons également la variable sans dimension $\theta = ct/a$.

En reportant, de manière classique maintenant, l'expression $v_{i\pm1} = v(x_i \pm a) = v(X \pm \varepsilon)$ exprimée par son développement de Taylor dans l'équation du mouvement (8.4), on obtient

$$\frac{c^2}{a^2}\frac{\partial^2 v}{\partial \theta^2} = \frac{c^2}{a^2}\left(\varepsilon^2 \frac{\partial^2 v}{\partial X^2} + \frac{\varepsilon^4}{12}\frac{\partial^4 v}{\partial X^4}\right) + \frac{c^2 \alpha \varepsilon}{a}\left[\left(\varepsilon\frac{\partial v}{\partial X} + \frac{\varepsilon^2}{2}\frac{\partial^2 v}{\partial X^2} + \dots\right)^2 - \left(\varepsilon\frac{\partial v}{\partial X} - \frac{\varepsilon^2}{2}\frac{\partial^2 v}{\partial X^2} + \dots\right)^2\right] \quad . \tag{8.5}$$

En conservant les termes jusqu'à l'ordre ε^4, on obtient

$$\frac{\partial^2 v}{\partial \theta^2} = \varepsilon^2 \frac{\partial^2 v}{\partial X^2} + \frac{\varepsilon^4}{12}\frac{\partial^4 v}{\partial X^4} + \alpha a \varepsilon^4 \frac{\partial}{\partial X}\left[\left(\frac{\partial v}{\partial X}\right)^2\right] \quad . \tag{8.6}$$

Cette équation posséde des termes faiblement dispersifs et faiblement non-linéaires. Si ces termes étaient absents, on obtiendrait une solution à profil constant dans le repère mobile à la vitesse du son (qui vaut ε dans notre notation). On peut donc supposer qu'en présence de ces termes dispersifs et non-linéaires, on aura une évolution lente de la solution dans le repère mobile. On traduit cela en se plaçant dans le repère mobile, c'est-à-dire en introduisant la variables $\xi = X - \varepsilon\theta$ et en choisissant une variable temporelle « lente » $\tau = \varepsilon^3\theta$. Le choix des puissances du paramètre ε provient de l'équilibre entre dispersion et non-linéarité comme nous l'avons déjà discuté. En reportant l'expression de ces nouvelles variables dans l'équation (8.4), on vérifie que, par construction du changement de repère, les termes d'ordre ε^2 s'éliminent alors que les termes d'ordre ε^4 conduisent à l'équation

$$2\frac{\partial^2 v}{\partial \xi \partial \tau} + \frac{1}{12}\frac{\partial^4 v}{\partial \xi^4} + \alpha a \frac{\partial}{\partial \xi}\left[\left(\frac{\partial v}{\partial \xi}\right)^2\right] = 0 \quad . \tag{8.7}$$

En posant $w = v_\xi$, on aboutit finalement à l'équation

$$w_\tau + \frac{1}{24} w_{\xi\xi\xi} + \alpha a\, w w_\xi = 0 \tag{8.8}$$

qui est l'équation de KdV.

L'obtention de cette équation à solitons est à la base de l'explication proposée par Zabusky et Kruskal pour le paradoxe FPU. Comme le montre la

figure 8.2, la condition initiale sinusoïdale (ligne pointillée) tend d'abord à former des fronts raides (ligne en trait interrompu), ce qui, comme nous l'avons vu, est lié à la forme de la non-linéarité de l'équation de KdV. Par la suite, on observe la décomposition de l'excitation initiale en une série d'impulsions qui sont des solitons. La figure permet même de vérifier la relation linéaire (1.5) entre l'amplitude des solitons et l'excès de leur vitesse par rapport à la vitesse du son car elle est responsable de l'alignement des sommets des solitons (qui sont spatialement équidistants). Les solitons ainsi créés évoluent en préservant leur forme et leur vitesse et, de temps à autre, se retrouvent dans la position qui reconstitue la condition initiale sinusoïdale, créant ainsi le phénomène de récurrence.

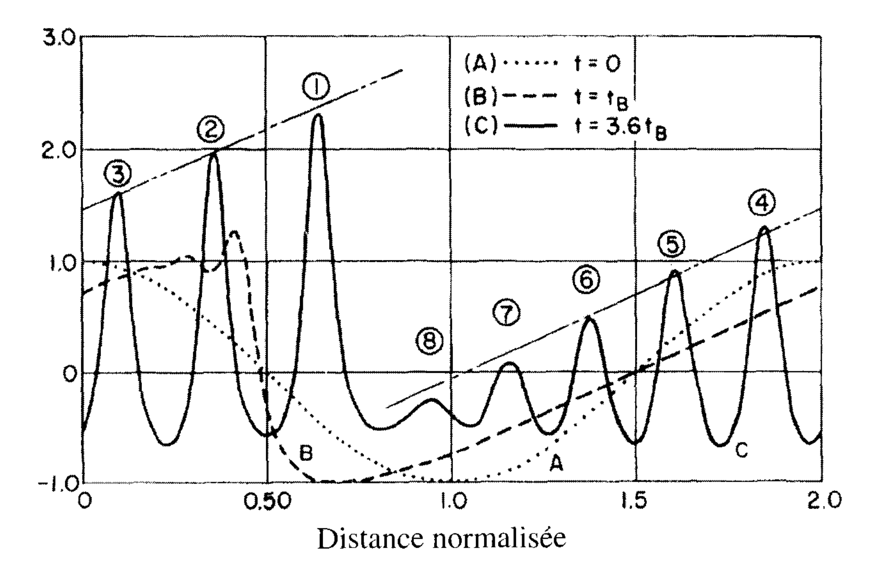


FIG. 8.2 – Évolution temporelle de la condition initiale de FPU, présentée dans l'espace réel à différents instants (adapté de la référence [160]).

Les figures 8.2 et 8.3 attirent immédiatement l'attention sur les particularités de la propagation des ondes dans un milieu non-linéaire, et le paradoxe de FPU ne serait sans doute pas resté inexpliqué pendant plus de dix ans si, avant les travaux de Zabusky et Kruskal, quelqu'un avait eu l'idée d'examiner le comportement du réseau non-linéaire par un graphique en fonction de la coordonnée d'espace. Mais les physiciens étaient tellement imprégnés de l'analyse des problèmes linéarisés, qui conduit naturellement à travailler dans l'espace de Fourier, quitte à rajouter ensuite les termes non-linéaires comme un couplage entre les modes, que l'observation de la formation des solitons à partir de l'excitation initiale sinusoïdale n'avait pas été faite.

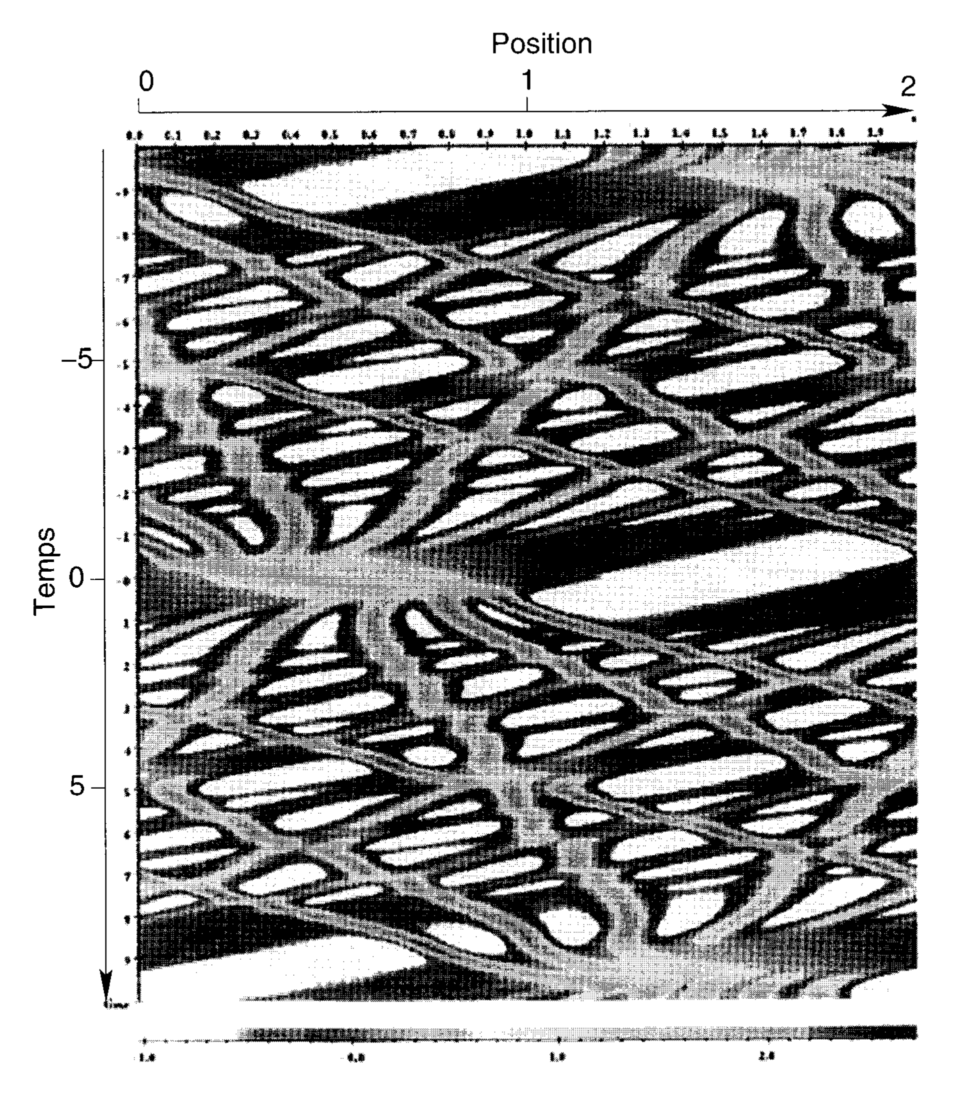
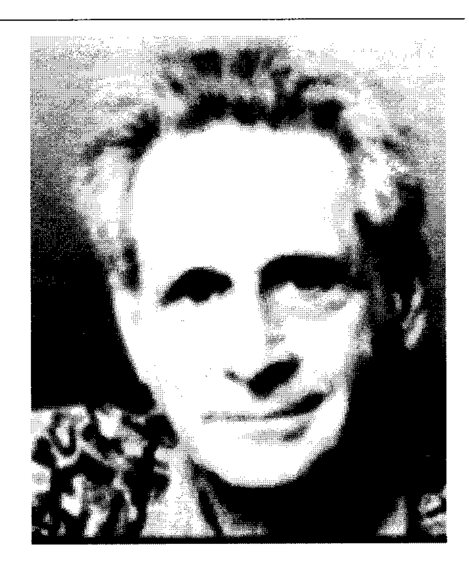


FIG. 8.3 – Évolution spatio-temporelle de la condition initiale $\cos(\pi x)$ dans un système avec des conditions aux limites périodiques et dont la dynamique est régie par une équation de KdV. Le temps et la position spatiale sont représentés verticalement et horizontalement respectivement. L'intensité de la vitesse est caractérisée quant à elle par l'échelle de gris précisée au bas de la figure (Représentation N.J. Zabusky).



MARTIN D. KRUSKAL, né en 1925 à New Rochelle, rencontra pendant sa jeunesse Richard Courant (1888-1972) qui fût plusieurs années plus tard son directeur de thèse à l'université de NewYork. Il devint professeur de la prestigieuse université de Princeton où il resta près de quarante ans. Ses premiers travaux furent consacrés aux mathématiques pures, mais il s'intéressa très vite à la toute nouvelle physique des plasmas qui est aussi celle des étoiles ou des générateurs thermonucléaires.

En 1954, Kruskal effectua un séjour de six semaines à Los Alamos dans le cadre du programme de recherche sur la fusion contrôlée, le projet Matterhorn. Il y rencontra à cette occasion S.M. Ulam avec lequel il discuta de nombreuses questions de mathématiques et de physique. Les résultats du problème que l'on nomme de nos jours FPU attirèrent tout particulièrement son attention car il reconnut immédiatement que c'était un exemple intéressant pour l'analyse asymptotique. Dans un premier temps, il n'eut cependant pas l'idée de considérer le problème dans le cadre de l'approximation des milieux continus (Photographie M.D. Kruskal).

NORMAN J. ZABUSKY (1929-), alors en stage post-doctoral à l'université de Princeton après une thèse à Caltech, fut fasciné au mois de janvier 1960 par un séminaire de Kruskal, intitulé « Quelques problèmes mathématiques non résolus ». Zabusky changea immédiatement de sujet de recherche et c'est ensemble qu'ils réussirent à expliquer le paradoxe de FPU en 1965, en découvrant le lien entre ce problème de relaxation vers l'équilibre dans les solides et l'onde solitaire découverte par J.S. Russell dans un canal écossais. Les premières tentatives *à la FPU* d'interaction de modes de Fourier furent infructueuses (Photographie N.J. Zabusky).

Les clés furent d'une part l'analyse asymptotique dans le cadre de l'approximation des milieux continus, mais aussi les simulations numériques effectuées par Zabusky que celui-ci qualifie de « KdV cinéma ». Désespérant d'obtenir de l'aide

du groupe de Los Alamos, il décida de mettre au point son propre code, avec l'aide précieuse de Gary Deem [159]. Ces simulations permirent de considérer l'évolution du système, non pas dans l'espace de Fourier mais dans l'espace réel, et donc d'identifier les différentes ondes non-linéaires localisées comme le montrent très bien la figure 8.3. L'utilisation de conditions aux limites périodiques pour la chaîne, au lieu des conditions aux limites fixes utilisées par Fermi, Pasta et Ulam, fut également décisive car elle permettait de mettre en évidence plus facilement les ondes progressives. Enfin, avec M.D. Kruskal, ils réalisèrent l'importance des effets de dispersion dans le réseau d'atomes, dont Fermi, Pasta et Ulam n'avaient pas perçu le rôle essentiel.

Il est intéressant de réaliser que l'équation de KdV à laquelle conduit l'analyse asymptotique présentée ci-dessus n'était pas enseignée par les mathématiciens à l'époque et ne figurait, par exemple, pas dans l'ouvrage de Courant et Hilbert [38] qui faisait déjà autorité. C'est assez étonnant puisque la présentation des équations aux dérivées partielles qui commençait par celles du premier ordre se poursuivait dans cet ouvrage par celles du deuxième ordre (équation d'onde, équation de la chaleur, etc.) avant de passer aux équations du quatrième ordre (équation biharmonique, équation du télégraphe, etc.). Celles du troisième ordre, comme l'équation de KdV, étaient totalement passées sous silence, vraisemblablement en raison de l'absence d'application. Lors d'un meeting sur les plasmas, Cliff Gardner et George Morikawa attirèrent l'attention de Kruskal et Zabusky sur les travaux de Korteweg et de Vries [85], référence bien connue des mécaniciens des fluides et présente dans une petite note de l'ouvrage de H. Lamb [88]. Ce fut le déclic !

C'est également Zabusky et Kruskal qui sont à l'origine du terme de soliton, puisqu'ils l'inventèrent en l'introduisant pour la première fois dans le titre de leur article [160]. De manière à mettre l'accent sur les propriétés des ondes solitaires, proches de celles de particules, ils eurent l'idée d'utiliser le suffixe « on », comme pour électron, proton, boson, etc. Zabusky proposa d'abord *solitron* comme abréviation de « solita–r–y wave » avant de s'apercevoir que c'était le nom d'une entreprise aux États-Unis. Ils optèrent donc finalement pour le choix de *soliton* qui est depuis passé à la postérité !

Kruskal découvrit par la suite la solution générale de l'équation de KdV [61] avant de consacrer ses recherches aux étranges nombres surréels qui généralisent les nombres réels ordinaires mais qui sont aussi susceptibles d'applications importantes pour l'analyse asymptotique qui sous-tend la recherche de Kruskal tout au long de sa carrière. Zabusky, quant à lui, obtint ultérieurement des résultats très importants en mécanique des fluides en utilisant avec toujours autant d'acuité les simulations numériques et la visualisation des résultats à laquelle il accorde une très grande importance, sous le nom de « visiométrique ».

Chapitre 9

Un modèle simple de dislocation dans les cristaux

9.1 Déformations plastiques des cristaux

Considérons la déformation d'un cristal par cisaillement (figure 9.1(a)) sous l'influence d'une force $\overrightarrow{F}$ appliquée sur sa surface (la surface inférieure étant supposée fixée).

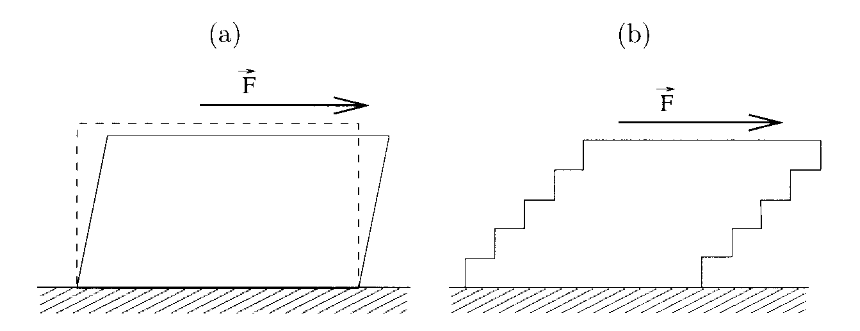


FIG. 9.1 – Déformation plastique d'un solide sous cisaillement : (a) vue macroscopique, (b) vue microscopique schématique.

Pour de faibles forces, la déformation est élastique mais, si on dépasse un certain seuil, le cristal subit une déformation plastique et reste déformé même après suppression de la force. D'un point de vue microscopique, cette déformation correspond au glissement d'un plan atomique sur un autre comme le schématise la figure 9.1(b). On peut chercher à évaluer l'ordre de grandeur de la force nécessaire (ou plutôt de la contrainte de cisaillement nécessaire $\sigma = F/S$, où S est l'aire sur laquelle la force F est appliquée) pour provoquer

une telle déformation, à partir de données typiques sur les propriétés d'un solide.

Considérons la structure microscopique du cristal, schématisée sur la figure 9.2. La contrainte σ provoque un déplacement x de deux couches atomiques situées de part et d'autre d'un plan de glissement. Cela implique une réorganisation des interactions inter-atomiques, certaines s'allongent, d'autres se raccourcissent. On revient à la structure initiale de ces interactions quand le déplacement x est devenu égal au paramètre de maille a[1]. La fonction $\sigma(x)$

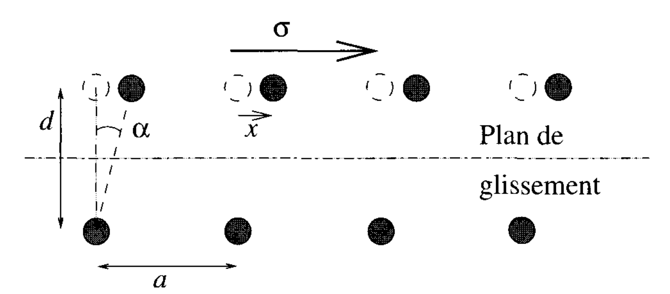


FIG. 9.2 – Aspect microscopique du cristal sous cisaillement.

doit donc avoir la périodicité du cristal et, pour obtenir un ordre de grandeur de la contrainte critique σ_c qui produit une déformation plastique, on peut se contenter de la fonction périodique la plus simple :

$$\sigma = \sigma_c \sin \frac{2\pi x}{a} \quad . \tag{9.1}$$

Pour évaluer σ_c, on utilise la théorie de l'élasticité pour les petits déplacements. Pour les faibles valeurs de x, on peut approcher σ par

$$\sigma \approx \sigma_c \frac{2\pi x}{a} \quad . \tag{9.2}$$

Par ailleurs le module de cisaillement G d'un solide distordu d'un angle α (cf. fig. 9.2) est défini par

$$\alpha = \frac{\sigma}{G} \qquad \text{ou} \qquad \alpha \approx \frac{x}{d} \quad , \tag{9.3}$$

où d est la distance interatomique dans la direction perpendiculaire au plan de glissement. La théorie de l'élasticité conduit donc à $\sigma \approx Gx/d$ ce qui donne, par comparaison avec l'expression (9.2)

$$\sigma_c \approx \frac{aG}{2\pi d} \quad . \tag{9.4}$$

1. En toute rigueur ce n'est vrai qu'à l'intérieur du cristal. Sur les bords certaines liaisons sont rompues. Ces effets sont cependant négligeables car la distance inter-atomique est de l'ordre de l'angtröm (10^{-10} m). Même pour un très petit cristal d'une taille de l'ordre d'un dixième de mm, les effets de bord ne portent que sur un millionième des liaisons le long de chaque ligne d'atomes.

Le module de cisaillement d'un matériau tel que l'aluminium est $G = 2{,}5 \cdot 10^{10}$ N.m^{-2}, alors que les mesures de σ_c donnent 10^6 à 10^7 N.m^{-2}, selon la pureté du matériau. Comme a et d sont comparables, on peut en conclure que l'évaluation de σ_c que nous avons faite donne des résultats complètement erronés. Vu l'importance du désaccord, on ne peut pas l'attribuer aux simplifications que nous avons faites car elles peuvent, tout au plus, changer le résultat d'un ordre de grandeur. Il faut s'interroger sur *les hypothèses même du calcul.*

Nous avons supposé qu'une couche atomique glissait en bloc sur une autre. En fait, on peut imaginer un autre moyen pour déplacer la couche avec une contrainte bien plus faible. Une analogie simple permet de comprendre les choses. Supposons que l'on veuille déplacer un grand tapis sur le sol. On peut se mettre à une extrémité et tirer sur le tapis. C'est le principe du calcul que nous avons fait pour évaluer σ_c. On peut aussi faire un pli à l'extrémité (cf. fig. 9.3a) puis faire glisser ce pli jusqu'à l'autre extrémité. Lorsqu'il est arrivé à l'autre extrémité, on a déplacé le tapis d'une quantité égale au déplacement qu'il avait fallu faire subir au bord pour créer le pli, mais la force à déployer a été bien plus faible. Pour la déformation plastique d'un solide, il existe un processus analogue au pli dans le tapis : la *création d'une dislocation*. Au lieu de déplacer toute la couche atomique, on peut déplacer seulement une

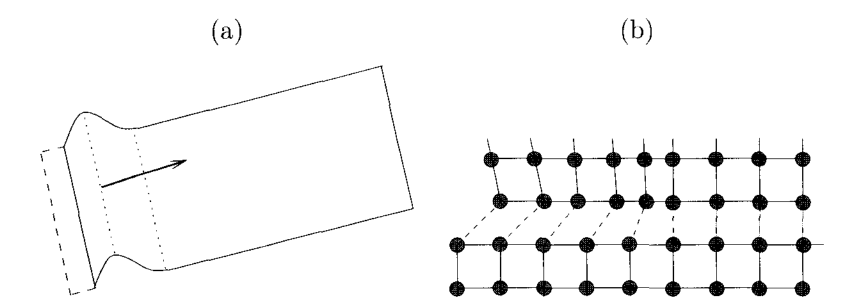


FIG. 9.3 – (a) Comment déplacer un tapis sans effort en créant un pli à partir d'un bord. (b) Schéma d'une dislocation « coin » dans un cristal, obtenue en déplaçant une extrémité d'une maille.

de ses extrémités d'une maille. On crée un défaut dans l'empilement cristallin qui a localement une densité d'atomes plus élevée que dans le cristal parfait. Ce défaut est appelé une « dislocation coin » (voir, par exemple, [80]). Sur une figure simplifiée comme 9.3b, la distorsion peut sembler très importante. En fait, lorsqu'on regarde l'empilement cristallin à une échelle plus grande, la distorsion peut être à peine visible (voir fig. 5 de [80]). Le déplacement de la dislocation d'un bord à l'autre du cristal conduit à une déformation plastique qui a été obtenue uniquement à partir de distorsions locales. La formation de la dislocation peut demander beaucoup moins d'effort que le déplacement en bloc d'une couche atomique. De plus, les cristaux sont en général imparfaits

et contiennent déjà de nombreuses dislocations. Pour les déformer plastiquement, il suffit de déplacer ces dislocations et c'est ainsi que l'on peut parvenir à des modules de cisaillement considérablement plus faibles que ceux qui résulteraient de déplacements en bloc de couches atomiques[2]. La dislocation coin que nous avons décrite est la plus simple, mais il existe de nombreuses autres géométries de dislocations dans les réseaux cristallins. Elles correspondent toutes à des déformations du réseau localisées sur des lignes ou des surfaces.

9.2 Un modèle unidimensionnel : le modèle de Frenkel–Kontorova

Un modèle contenant l'essentiel de la physique de la dislocation coin a été proposé en 1939 par Frenkel et Kontorova (FK) [59, 2]. Il décrit la dynamique d'une rangée d'atomes situés au-dessus du plan de glissement (cf. fig. 9.4).

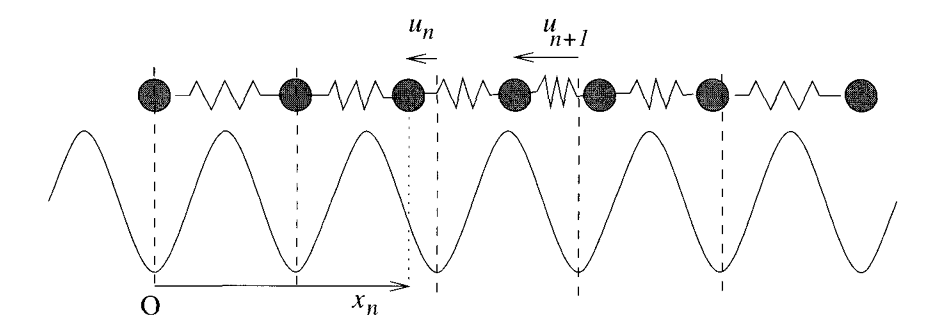


FIG. 9.4 – Le modèle de Frenkel–Kontorova (FK) pour une dislocation coin.

L'atome indexé par n est repéré par sa position x_n par rapport à une origine située sur la position d'équilibre d'un atome dans le cristal parfait (cf. fig. 9.4), ou par son déplacement $u_n = x_n - na$ par rapport à sa position d'équilibre (a est le paramètre de maille dans la direction de la rangée d'atomes étudiée). Un atome est soumis au potentiel $V(u_n)$ créé par les atomes situés sous le plan de glissement qui sont traités comme un substrat fixe. Le « potentiel de substrat » $V(u_n)$ a la périodicité du réseau et le modèle FK le représente par la fonction périodique la plus simple :

$$V(u_n) = V_0 \left(1 - \cos \frac{2\pi u_n}{a}\right) . \qquad (9.5)$$

2. Les plombiers connaissent bien le phénomène. S'ils veulent couder un tuyau de cuivre, ils ne prennent pas du tube recuit, qui a peu de dislocations et est donc rigide, mais du tube écroui qui est beaucoup plus déformable. C'est pour la même raison que, lorsque l'on tord un fil de fer, la première torsion est difficile, mais qu'après quelques cycles de torsion-redressement, il devient très facile à plier. On y a créé un grand nombre de dislocations.

Il faut de plus tenir compte des interactions entre les atomes d'une rangée (ou plus exactement entre les plans atomiques qui sont situés au-dessus du plan de glissement). Le potentiel d'interaction dépend des déplacements *relatifs* de deux atomes consécutifs qui sont faibles par rapport à leur distance d'équilibre, même au cœur d'une dislocation. Contrairement au cas du potentiel $V(u_n)$ dont on ne peut négliger l'anharmonicité puisqu'il faut pouvoir décrire de grands déplacements des atomes, pour le potentiel d'interaction, on peut se contenter d'une approximation harmonique pour l'énergie d'interaction entre les atomes $n-1$ et n qui est écrite sous la forme

$$W(u_{n-1}, u_n) = \frac{C}{2}(u_n - u_{n-1})^2 \,, \qquad (9.6)$$

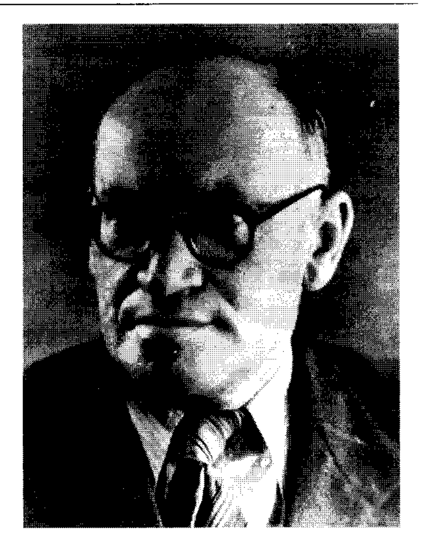
de sorte que l'hamiltonien du système s'écrit

$$H = \sum_n \frac{p_n^2}{2m} + W(u_{n-1}, u_n) + V(u_n) \qquad (9.7)$$

$$= \sum_n \frac{p_n^2}{2m} + \frac{C}{2}(u_n - u_{n-1})^2 + V_0\left(1 - \cos\frac{2\pi u_n}{a}\right) \,, \qquad (9.8)$$

où m est la masse d'un atome et $p_n = m\, \mathrm{d}u_n/\mathrm{d}t$ sa quantité de mouvement.

Ce modèle contient des ingrédients essentiels pour admettre des solutions de type soliton : la non-linéarité provenant du potentiel de substrat et la coopérativité assurée par les interactions inter-atomiques. Nous allons voir qu'en effet les solitons existent dans ce système ... ou presque.



Fils d'un activiste notoire de la période pré-révolutionnaire, YAKOV ILYICH FRENKEL (1894-1952) est arrivé à l'université de Saint Petersbourg à l'époque de la révolution russe. Après son premier article consacré au différentiel de voiture (!), il eut un début de carrière un peu chaotique, notamment à cause d'accusations d'« agitateur bolchévique » qui le conduisirent en prison. Jeune chercheur, il fut tout particulièrement soutenu par Paul Ehrenfest (1880-1933) qui, se trouvant au centre des principaux événements qui ont révolutionné le XXe siècle de la physique, a joué un rôle très important pour aider les jeunes physiciens théoriciens russes à atteindre un niveau mondial dans cette période post-révolutionnaire peu favorable (Photographie AIP Emilio Segré Visual Archives, Frenkel Collection).

Il présenta sa candidature à une bourse de la fondation Rockefeller en Europe, ce qui lui permit de passer l'année 1926 en Allemagne, en France et en Angleterre où il rencontra de très nombreux physiciens : Einstein, Brillouin, Langevin, etc., puis il passa les six premiers mois de l'année 1931 aux États-Unis. Deux post-doctorats à l'étranger avant l'heure !

Ses contributions majeures sont en physique des solides et des liquides, mais il en a également eu d'essentielles en électrodynamique classique ainsi qu'en physique nucléaire. L'approche de Frenkel était caractérisée par l'introduction de modèles physiques simples et originaux, en lien avec l'utilisation minimale d'outils mathématiques. Le modèle de plasticité développé avec T. Kontorova constitue ainsi, en physique des solides, la première tentative de description de la dynamique d'un défaut bidimensionnel étendu par un modèle unidimensionnel d'une chaîne discrète. Couronnée de succès, cette approche sera renouvelée très souvent en physique des solides bien sûr, mais aussi dans de nombreuses branches de la physique. Il publia le premier cours complet de physique théorique en Union Soviétique et fût avec V.A. Fock (1898-1974) le premier à y enseigner la Mécanique quantique. Peintre et violoniste de talent [60], il s'éteint brutalement en 1952.



TATIANA KONTOROVA, née en 1911 à Saint Petersbourg, effectua ses études à l'université polytechnique d'état de Saint Petersbourg. Elle obtint sa thèse en 1939 grâce à ses travaux sur les dislocations avec Frenkel. Elle fut enseignant-chercheur dans ce même institut et est auteur d'une cinquantaine d'articles. Elle traduisit également en russe le livre *Electronic Theory of Semiconductors* de William Shockley. Elle s'est éteinte au début des années 1980 (Photographie Ioffe Institute).

9.3 L'approximation des milieux continus : l'équation sine-Gordon

Les équations du mouvement des atomes, déduites de l'hamiltonien (9.8) sont

$$m\frac{\mathrm{d}^2u_n}{\mathrm{d}t^2} = C(u_{n+1} + u_{n-1} - 2u_n) - \frac{2\pi V_0}{a}\sin\frac{2\pi u_n}{a} \quad . \tag{9.9}$$

Comme dans le cas du problème FPU, on obtient un système d'équations différentielles non-linéaires couplées. C'est une situation fréquente en physique

des solides. Ce système, d'expression pourtant simple, *n'a pas de solution analytique connue* et, comme dans le cas du problème FPU, nous allons devoir faire des approximations pour le résoudre. La linéarisation est exclue si l'on veut pouvoir traiter les grands déplacements qui sont au coeur d'une dislocation, mais, comme dans le problème FPU, on peut utiliser l'approximation des milieux continus en remplaçant l'ensemble de variables discrètes $u_n(t)$ par la fonction continue $u(x,t)$ telle que $u_n(t) = u(x = na, t)$. En développant $u_{n\pm1}(t)$ autour de $u_n(t)$, on obtient

$$u_{n\pm1}(t) = u[(n\pm1)a, t] = u(na, t) \pm a\frac{\partial u}{\partial x}(na, t) + \frac{a^2}{2}\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(na, t) + \dots \quad . \tag{9.10}$$

En limitant le développement à l'ordre 2, le système d'équations (9.9) devient

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - \frac{Ca^2}{m}\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{2\pi V_0}{ma}\sin\frac{2\pi u}{a} = 0\ . \tag{9.11}$$

En posant $\theta(x,t) = 2\pi u(x,t)/a$, $c_0^2 = Ca^2/m$, $\omega_0^2 = 4\pi^2 V_0/(ma^2)$, on obtient l'équation de SG suivante :

$$\frac{\partial^2 \theta}{\partial t^2} - c_0^2\frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} + \omega_0^2 \sin\theta = 0 \quad . \tag{9.12}$$

Cette description suggère donc que les solutions de l'équation (9.12) pourraient correspondre aux dislocations discutées ci-dessus.

9.4 Les dislocations sont-elles des solitons ?

Il est légitime de mettre en doute le résultat que l'on vient de présenter, puisque si les dislocations étaient des solitons, une fois créées, elles se propageraient sans déformation et à vitesse constante. Comme l'expérience quotidienne nous a convaincu que toute déformation amorcée sur le matériau ne se poursuit pas spontanément, on doit remettre en cause le modèle.

En réalité, plus que le modèle, c'est le traitement de celui-ci qui est sujet à caution : l'approximation des milieux continus n'est pas une description justifiée dans le cadre de la dynamique des dislocations. En effet, dans un milieu réel, celles-ci sont très étroites par rapport au pas du réseau a, comme le suggère la figure 9.5.

L'approximation des milieux continus ne peut donc donner qu'une description très approchée. Les dislocations ne sont pas des solitons au sens strict, cependant, cela ne signifie pas que le concept de soliton est inutile pour décrire les excitations non-linéaires dans des systèmes où la discrétisation est importante. Il constitue un bon point de départ, mais il faut tenir compte d'effets supplémentaires : la présence du réseau introduit de nouvelles caractéristiques telles que le piégeage de soliton ou l'émission d'ondes de faible amplitude.

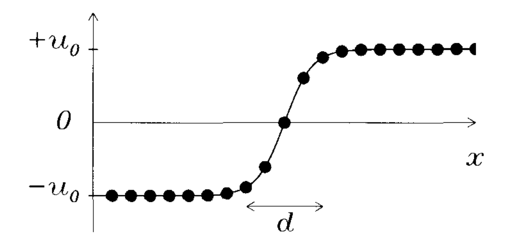


FIG. 9.5 – Les cercles représentent la position des atomes au niveau d'une dislocation, alors que la courbe continue représente la solution de l'équation obtenue par l'approximation des milieux continus. On note que la largeur du soliton correspond à environ deux pas du réseaux.

Pour le comprendre, il suffit d'examiner en détail les positions des particules par rapport au potentiel de substrat $V(u)$ selon l'intensité du couplage qui les lie. Lorsque le couplage est très fort, le soliton est étendu, ce qui signifie que le déplacement des particules d'un puits au suivant varie très progressivement de zéro à un pas de réseau. Il existe par conséquent des particules à tous les niveaux du potentiel de substrat, y compris en son maximum. Dans cette description quasi-continue, il est alors facile de comprendre pourquoi la dislocation (ou le soliton) peut se déplacer librement. Considérons la figure 9.6(a) et supposons que l'on cherche à déplacer progressivement le centre du soliton depuis sa position actuelle, marquée par la flèche en trait plein sur la figure, vers la position marquée par la flèche en pointillés. Quand le déplacement sera effectué, les particules occuperont les positions à l'intersection entre la courbe représentant le potentiel (en trait plein) et la courbe en pointillés sur la figure 9.6a. Lors de la translation progressive de la courbe en pointillés vers sa nouvelle position, certaines particules vont monter la barrière de potentiel de substrat tandis que d'autres la descendent. Le bilan énergétique sera nul car il y aura compensation entre les augmentations et les diminutions, pour chaque position intermédiaire du soliton. Dans la version continue du modèle qui conduit, comme nous l'avons vu, à l'équation de SG, le système est invariant par n'importe quelle translation, et le mouvement libre du soliton est une manifestation de cette symétrie de translation, qui conduit, comme nous l'avons vu au chapitre 5, au mode de Goldstone.

Lorsque le couplage est faible, comme dans le cas des dislocations, le défaut est très localisé, c'est-à-dire que la largeur de la distorsion est faible devant le pas du réseau. Bien que quelques particules soient légèrement déplacées du minimum du potentiel comme le montre la figure 9.6(b), les ressorts ne sont pas suffisamment forts pour maintenir les particules au sommet du potentiel de substrat. Si l'on cherche, comme précédemment, à déplacer progressivement le défaut, au cours de la translation il faudra temporairement amener une particule sur le maximum du potentiel de substrat (lorsque le défaut sera à la

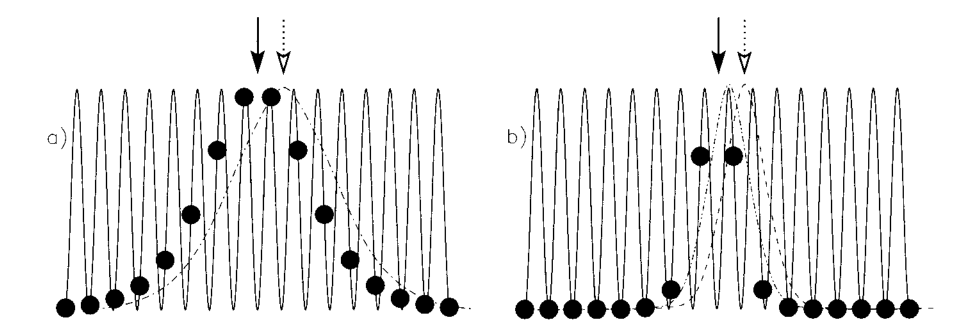


FIG. 9.6 – Positions de particules couplées de manière harmonique et soumise à un potentiel de substrat périodique. Les figures (a) et (b) représentent un défaut respectivement étendu et étroit ; les particules dans la partie droite de la chaîne ont été déplacées vers le creux de potentiel voisin. Dans le cas (b), les atomes situés à proximité du centre de la dislocation sont très proches du *minima* du potentiel. Pour déplacer le défaut d'une maille, il faudra temporairement amener un atome sur le maximum de potentiel, ce qui demandera de l'énergie.

position intermédiaire entre les deux flèches, représentée de la figure 9.6(b)). Dans cette position le défaut aura une énergie plus grande que dans les positions où son centre correspond à l'une des flèches. Il existe par conséquent une barrière à la translation libre du défaut, que l'on appelle dans la théorie des dislocations, la barrière de Peierls-Nabarro (PN), qui a été redécouverte dans le cadre de la théorie des solitons discrets (qui ne sont d'ailleurs que des « quasi-solitons », bien que nous ayons conservé le terme de soliton par commodité).

Dans la discussion que nous avons présentée pour faire saisir intuitivement l'origine de la barrière de PN, nous n'avons considéré que les variations de l'énergie potentielle de substrat durant la translation. Pour être complet, il faut aussi tenir compte des variations de l'énergie potentielle élastique d'interaction entre les particules mais cela ne change pas le résultat : pour un défaut étroit, la translation par rapport au réseau ne se fait pas à énergie potentielle constante.

Le cas d'une dislocation, étendue seulement sur quelques mailles, correspond à un cas intermédiaire entre la situation d'une particule individuelle, pour laquelle l'énergie à fournir correspond à toute la profondeur du potentiel de substrat, car on ne « récupère » pas d'énergie au niveau d'une autre particule qui simultanément descend le long du potentiel de substrat, et la limite continue dans laquelle le soliton est totalement libre de se déplacer. Dans ce cas intermédiaire, le défaut se déplace comme une excitation atomique collective sur un potentiel effectif, le potentiel de PN, qui a la période

du réseau mais une amplitude[3] beaucoup plus faible que celle du potentiel de substrat. Cette analyse explique pourquoi la contrainte critique d'une déformation plastique d'un cristal est de plusieurs ordres de grandeurs plus faible que la contrainte qui induirait un déplacement total d'un plan atomique sur un autre [80], mais elle n'est cependant pas nulle : la dislocation n'est pas libre de se déplacer. Il faut une contrainte minimale pour déformer un matériau, même si des dislocations y ont déjà été créées.

La mobilité d'une dislocation est accompagnée d'une émission de vibrations de réseau qui se traduit par un échauffement, très perceptible lorsqu'on fait subir à un matériau de fortes déformations plastiques qui mettent en mouvement de nombreuses dislocations. On peut comprendre l'origine de cette émission de phonons en remarquant que, durant la translation d'un défaut étroit, un atome est porté au maximum du potentiel de substrat avant de retomber rapidement dans un minimum. Quand il rejoint le minimum, il tend à osciller au lieu de s'arrêter exactement au minimum, contrairement au cas du couplage fort pour lequel la retombée vers le minimum est très progressive et où, de plus, l'atome est maintenu par une forte interaction élastique avec ses voisins. Le rayonnement de modes non localisés se traduit par une diminution de l'énergie du défaut qui est freiné, comme le montre la figure 9.7. On constate d'abord une baisse rapide de sa vitesse due à un rayonnement intense puis une quasi-stabilisation qui semble indépendante de la vitesse initiale.

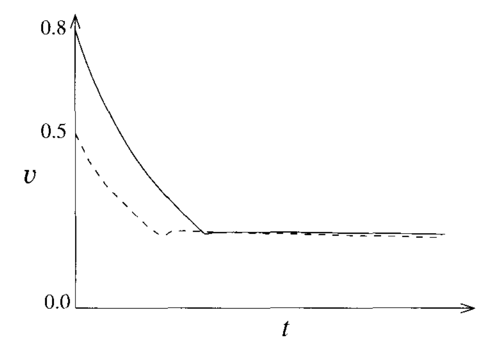


FIG. 9.7 – Évolution schématique de la vitesse d'une excitation de type soliton en fonction du temps dans un modèle de FK. La courbe continue (resp. pointillée) correspond à une vitesse initiale de 0,8 (resp. 0,5).

Il est possible de proposer une interprétation simple de ces résultats numériques. Pour calculer le rayonnement émis, qui est de faible amplitude, on considère les équations de mouvement linéarisées pour le réseau atomique et l'on traite l'effet du soliton comme s'il s'agissait d'une action extérieure responsable du déplacement des particules au-dessus de la barrière de potentiel

3. On montre que cette barrière de PN est une fonction exponentiellement décroissante de la largeur du soliton.

de substrat. Pour cela, on ajoute aux équations linéarisées une force $f_n(t)$ qui correspond à l'action du soliton sur les particules. L'équation du mouvement correspondante s'écrit, par conséquent,

$$\ddot{u}_n - C(u_{n+1} + u_{n-1} - 2u_n) + \omega_0^2 u_n = f_n(t) \quad . \tag{9.13}$$

Pour comprendre qualitativement les phénomènes, il n'est pas nécessaire de connaître l'expression de la force $f_n(t)$. Le point important est que, comme le soliton se déplace à la vitesse v, dans un réseau de pas a, il est légitime de supposer que l'on a $f_{n+1}(t) = f_n\,(t - a/v)$ ou plus généralement $f_n(t) = f_0\,(t - na/v)$. Cette force est susceptible d'exciter des ondes planes de la forme $\cos(\omega t - qn) = \cos\omega\,(t - qn/\omega)$ lorsque la condition de résonance $q/\omega = a/v$ est vérifiée. L'étude de l'intersection de cette « relation de dispersion du soliton », $\omega = qv/a$, avec la relation de dispersion du réseau de particules montre que l'émission d'ondes dans le mode fondamental cesse pour la vitesse v à laquelle on observe une stabilisation [126].

9.5 Les applications

Le modèle de FK permet de comprendre la déformation plastique des matériaux. Les effets coopératifs sont nécessaires pour expliquer pourquoi les cristaux ont des comportements de type plastique contrairement aux verres, qui n'ont pas d'ordre à longue distance.

Le modèle explique également pourquoi plus un cristal est parfait moins il est plastique. En effet, un cristal parfait ne possède, par définition, aucune dislocation préexistante. Il faut donc les créer avant de pouvoir déformer le matériau. Dans un cristal imparfait, au contraire, il suffit de mettre en mouvement les nombreuses dislocations présentes. En outre, comme ces dislocations sont des quasi-solitons, leur mise en mouvement est relativement aisée, bien qu'il faille vaincre la barrière de potentiel de PN. Les cristaux très purs de silicium que réalise l'industrie électronique sont très fragiles car ils ne contiennent que très peu de dislocations qui permettraient leur déformation plastique au lieu d'une rupture.

À partir des propriétés des solitons, il est possible d'établir un certain nombre de prédictions quantitatives sur les dislocations. Ainsi le calcul de leur énergie de création correspond à l'énergie du soliton que nous avons calculée au chapitre 2. Le calcul du coefficient de friction lors du mouvement est également possible à partir de l'énergie rayonnée sous forme de vibrations du réseau après le passage du quasi-soliton. Enfin, il est possible d'estimer le taux maximum de déformation par unité de temps à partir de la vitesse limite de propagation des dislocations, qui correspond à la vitesse du son dans le cristal.

En nous restreignant au modèle FK de la dislocation, nous avons limité notre étude à une dimension. En fait quand on déforme plastiquement un échantillon par cisaillement, on déplace une *ligne de dislocation* comme le montre le schéma 9.3. La dislocation du modèle FK correspond à un point

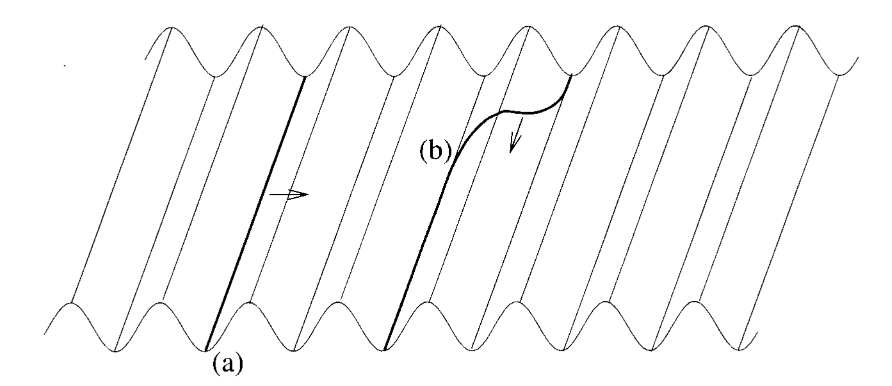


FIG. 9.8 – Schéma du mouvement d'une ligne de dislocation (en trait fort) à deux dimensions dans le potentiel de PN dû aux effets de discrétisation. Noter que ce potentiel *n'est pas le potentiel auquel sont soumis les atomes* mais le potentiel auquel est soumise la dislocation. On peut envisager de déplacer toute la ligne de dislocation simultanément (cas (a)) mais on peut aussi créer un « kink » dans la dislocation (cas (b)) et le déplacer dans le sens de la largeur de l'échantillon.

sur cette ligne, mais pour mieux comprendre le mouvement des dislocations, il faut considérer le système bidimensionnel que constitue le plan de glissement parallèle auquel se fait le cisaillement. Lorsque l'on passe ainsi à deux dimensions, le potentiel de PN dû à la discrétisation prend l'allure d'une « tôle ondulée » dont les plis sont orthogonaux au plan de la figure du modèle FK (cf. fig. 9.4). Lorsqu'elle est en équilibre au minimum du potentiel PN, la ligne de dislocation suit un fond de vallée de potentiel. En travaillant avec le modèle FK, nous avons fait implicitement l'hypothèse que la dynamique du cristal était invariante dans la direction orthogonale au plan de la figure 9.4. Dans cette hypothèse, déplacer le quasi-soliton du modèle FK revient, dans le plan de glissement, à déplacer globalement toute la ligne de dislocation (cas (a) de la figure 9.8). Or, dans le cristal, rien n'impose un déplacement en bloc de la dislocation. Il est coûteux en énergie puisque tous les points constituant la ligne de dislocation doivent franchir simultanément un maximum du potentiel de PN. L'« astuce » qui a consisté à introduire la dislocation pour éviter de déplacer en bloc un plan d'atomes peut aussi être utilisée pour déplacer la dislocation ! Au lieu de déplacer en bloc la ligne de dislocation, on peut imaginer d'y créer un défaut en ne passant qu'une petite portion de la ligne de dislocation au-dessus de la barrière de PN. On crée ainsi un « kink » dans la dislocation. En déplaçant maintenant ce kink *dans la direction de la ligne de dislocation*, on peut faire progresser la ligne de dislocation d'un pas de réseau (cas (b) de la figure 9.8). Puis on recommence à créer un kink dans la dislocation pour lui faire franchir une nouvelle maille. L'étude quantitative de ce processus montre que cette méthode est moins coûteuse énergétiquement que celle qui consiste à déplacer toute la ligne de dislocation en bloc.

Ce processus explique pourquoi la mobilité des dislocations peut être plus grande que ce que donne le modèle FK. De plus, ce mécanisme est particulièrement intéressant car il revient à créer un *soliton dans le soliton*, montrant que l'idée même de la dynamique assistée par la présence de solitons peut être examinée à plusieurs niveaux [2], le soliton devenant lui-même un objet qui peut à son tour présenter une dynamique faisant appel à des solitons !

Chapitre 10

Parois de domaines dans les matériaux ferroélectriques

NOUS ALLONS PRÉSENTER MAINTENANT un deuxième exemple dans lequel les positions des atomes dans un cristal sont bien représentées par une équation ayant des solutions quasi-solitons. L'existence de ces solitons permet d'interpréter, en outre, certaines propriétés des matériaux diélectriques qui avaient longtemps résisté à l'analyse théorique.

10.1 Matériaux ferroélectriques

Un matériau ferroélectrique possède un moment dipolaire électrique permanent qui subsiste même en l'absence de champ extérieur appliqué. Le moment par unité de volume constitue la *polarisation* $\overrightarrow{P}$ du matériau. Dans un ferroélectrique, cette polarisation peut être inversée en appliquant un champ extérieur assez fort dans le sens opposé. Elle dépend de la température et disparaît au-dessus d'une température critique, notée T_c. Pour des températures supérieures à la température critique, le matériau est dans un état dit paraélectrique, sans polarisation spontanée, comme le montre la figure 10.1.

On distingue deux types de matériaux ferroélectriques : les ferroélectriques de type déplacement et de type ordre-désordre.

10.1.1 Ferroélectrique de type déplacement : le titanate de baryum

Le titanate de baryum $BaTiO_3$ est le prototype du ferroélectrique de type déplacement qui possède une structure ordonnée qui change de symétrie au passage de la transition ferroélectrique-paraélectrique. À haute température, le matériau est dans un état *paraélectrique* cubique. L'ion titane Ti^{4+}, situé au centre de la maille, est entouré d'un octaèdre régulier d'ions oxygène O^{2-}.

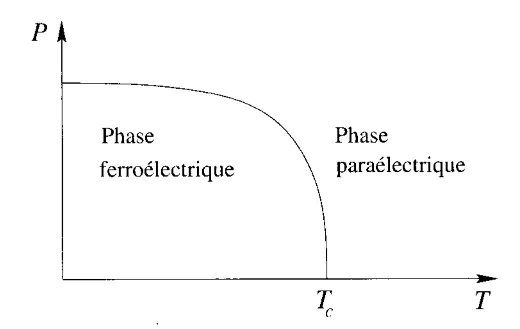


FIG. 10.1 – Évolution de la polarisation spontanée P d'un ferroélectrique en fonction de la température.

Quand la température est abaissée en-dessous de la température critique T_c, une distorsion quadratique de la maille se produit. L'octaèdre d'oxygènes s'allonge dans la direction de l'axe c, et, au lieu d'une position d'équilibre du titane au centre de la maille, il existe deux positions possibles pour l'ion Ti^{4+}, décalé dans un sens ou dans l'autre par rapport au plan médian de la maille (fig. 10.2). Le centre de gravité des charges positives (Ti^{4+} et Ba^{2+}) est décalé par rapport au centre de gravité des charges négatives (O^{2-}). Les décalages de $\pm u_0$, vers le haut ou vers le bas correspondent à deux états de polarisation spontanée $\pm\overrightarrow{P_s}$. Le matériau est passé dans la phase *ferroélectrique.*

La structure des deux phases du titanate de baryum indique que le potentiel cristallin dans lequel se trouve l'ion titane a l'allure représentée sur la figure 10.3 selon que le matériau se trouve dans la phase paraélectrique ou ferroélectrique. Dans la phase ferroélectrique, le titane est assez mobile dans l'octaèdre créé par les oxygènes pour qu'un champ électrique appliqué au matériau puisse le faire basculer d'un minimum à l'autre, réalisant ainsi une inversion de la polarisation.

Le passage ferro-para correspond par conséquent à un *déplacement en bloc et ordonné* des ions. Tous les ingrédients sont donc réunis pour avoir des solitons puisque les phénomènes non-linéaires sont présents, étant donné la forme en double puits du potentiel, mais également en raison du couplage fort entre les particules induisant des effets coopératifs importants.

10.1.2 Ferroélectrique de type ordre-désordre : le nitrite de sodium

La polarisation du nitrite de sodium $NaNO_2$ provient du moment dipolaire des groupements NO_2^-. À basse température les interactions dipolaires favorisent une phase où tous les groupements NO_2^- ont la même orientation. Leurs moments dipolaires s'ajoutent et le matériau a une polarisation spontanée. C'est la phase ferroélectrique ordonnée (fig. 10.4). Lorsque la température

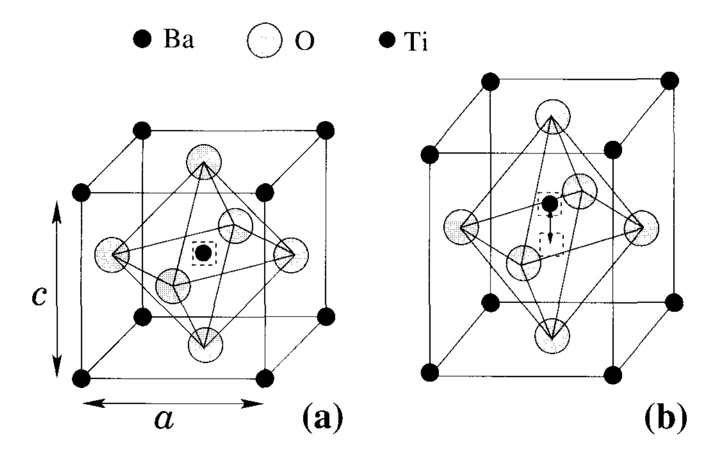


FIG. 10.2 – La figure (a) représente la structure du titanate de baryum à haute température, alors que la figure (b) la représente en dessous de la température critique. Le carré indique les positions accessibles pour l'ion Ti^{4+}. Dans la phase paraélectrique (a), il n'existe qu'une seule position d'équilibre située dans le plan médian de la maille. Dans la phase ferroélectrique (b), il existe deux positions de part et d'autre du plan médian. La distorsion de la phase quadratique par rapport à la phase cubique a été exagérée par rapport à la réalité, pour la lisibilité de la figure.

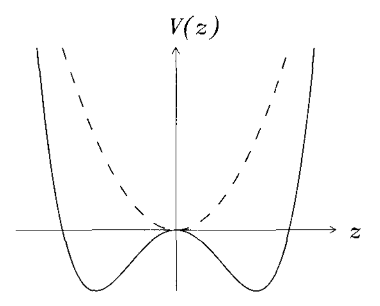


FIG. 10.3 – Représentation du potentiel cristallin dans lequel se trouvent les ions titane dans la phase paraélectrique (courbe pointillée) et dans la phase ferroélectrique (ligne continue) du titanate de baryum.

s'élève, l'agitation thermique croît et pour les températures supérieures à T_c, l'orientation des groupements NO_2^- peut s'inverser, l'atome d'azote passant entre les deux oxygènes comme dans le cas plus connu de la résonance de l'ammoniac NH_3. Il en résulte des sauts aléatoires entre les deux positions, accompagnés d'une faible modification du réseau des ions sodium. Les fréquences des sauts sont extrêmement élevées, de l'ordre de 10^{10} Hz. Comme les sauts sont pratiquement décorrélés, la polarisation résultante moyenne est nulle :

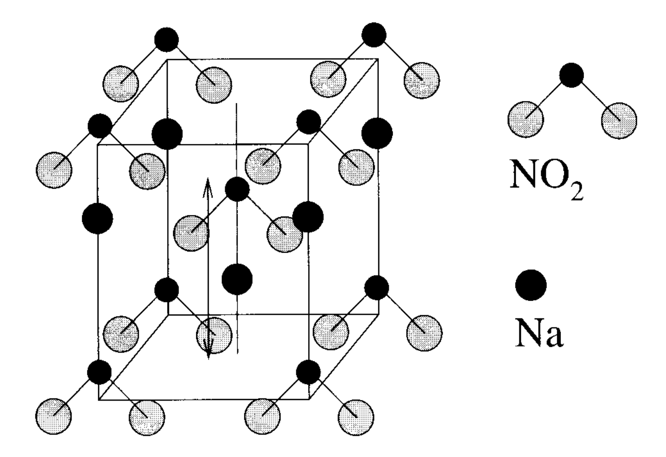


FIG. 10.4 – Représentation de $NaNO_2$ dans sa phase ferroélectrique à basse température ($T < T_c$).

le cristal est devenu paraélectrique désordonné. Sous l'action d'un champ électrique extérieur, une orientation peut néanmoins être favorisée. Le nitrite de sodium prend une polarisation induite, caractéristique d'un matériau paraélectrique.

Dans le nitrite de sodium, comme pour le titanate de baryum, le mouvement des atomes qui déterminent la polarisation est décrit par un potentiel double puits, mais pour un ferroélectrique ordre-désordre, les mouvements ne sont que très faiblement corrélés.

10.1.3 Les parois de domaines ferroélectriques

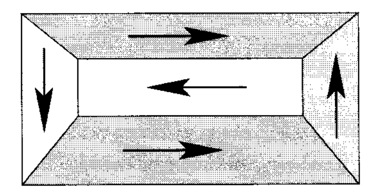


FIG. 10.5 – Schéma d'un matériau ferroélectrique polydomaine.

Sauf lorsqu'ils sont spécialement préparés, les matériaux ferroélectriques sont rarement dans un état uniforme de polarisation. Par exemple, quand on refroidit un cristal de titanate de baryum à partir de la phase cubique paraélectrique, au moment où la distorsion quadratique apparaît, elle peut se faire selon n'importe lequel des axes du cube, et, pour chacune de ces orientations, la polarisation peut être dans un sens ou dans un autre (fig. 10.5). Le matériau est donc en général formé de *domaines* à l'intérieur desquels la polarisation est uniforme, séparés par des *parois de domaines* qui sont d'étroites régions (en général d'une largeur de quelques mailles cristallines) dans lesquelles la polarisation bascule d'une orientation à une autre. Dans un matériau comme le titanate de baryum,

dans lequel la symétrie de la phase paraélectrique autorise des orientations multiples au moment de la transition, certaines parois peuvent séparer deux domaines dans lesquels les polarisations sont orthogonales. On trouve plus souvent des parois séparant deux domaines où les polarisations sont opposées.

10.2 Modèle unidimensionnel de ferroélectrique

Il est possible de proposer un modèle de cristal ferroélectrique conçu dans le même esprit que le modèle FK des dislocations, c'est-à-dire ne retenant que les caractéristiques physiques essentielles du matériau et se limitant à une seule direction spatiale. Ce modèle a été proposé quasi simultanément par S. Aubry [18] d'une part, et J. Krumhansl et R. Schrieffer [87] d'autre part. Il permet de modéliser la structure des parois de domaines et d'en déduire certaines propriétés du matériau comme sa réponse diélectrique.

On considère une chaîne d'atomes couplés, correspondants aux ions titane, placés chacun dans un potentiel double puits que l'on appelle généralement potentiel de substrat. Il correspond au potentiel créé par les autres atomes du réseau. Nous présentons ici le cas plus simple où ce potentiel est supposé *fixe*, bien que l'on puisse tenir compte des modifications du substrat accompagnant les mouvements des ions titane dans un modèle plus élaboré. Au niveau de description où nous nous plaçons, il n'est pas nécessaire de chercher à décrire quantitativement le potentiel dans lequel se trouve le titane. Si l'on se contente d'une description qualitativement correcte, il est intéressant de choisir une expression analytique qui facilite les calculs. On choisit généralement le potentiel

$$V(u) = V_0 \left(1 - \frac{u^2}{u_0^2}\right)^2 \quad . \tag{10.1}$$

Le modèle que nous venons de décrire correspond à la figure 10.6. En se limitant au couplage entre premiers voisins, l'hamiltonien du système est

$$H = \sum_i \frac{1}{2} m \dot{u}_i^2 + \frac{C}{2} \left(u_{i+1} - u_i\right)^2 + V_0 \left(1 - \frac{u_i^2}{u_0^2}\right)^2 \quad , \tag{10.2}$$

où l'on distingue successivement le terme d'énergie cinétique, l'énergie de couplage harmonique et enfin l'énergie potentielle de substrat. Comme dans le cas du modèle FK des dislocations, le potentiel d'interaction concerne le déplacement *relatif* de deux ions voisins, qui reste faible. Il peut donc être choisi harmonique.

Selon les paramètres que l'on choisit, le modèle peut décrire les deux types de ferroélectriques. En effet, si l'on considère le cas où le couplage est faible vis-à-vis du potentiel de substrat, on obtient un ferroélectrique de type ordre-désordre. Dans un tel cas, l'énergie intersite de couplage est nettement insuffisante pour faire franchir la barrière de potentiel à deux atomes

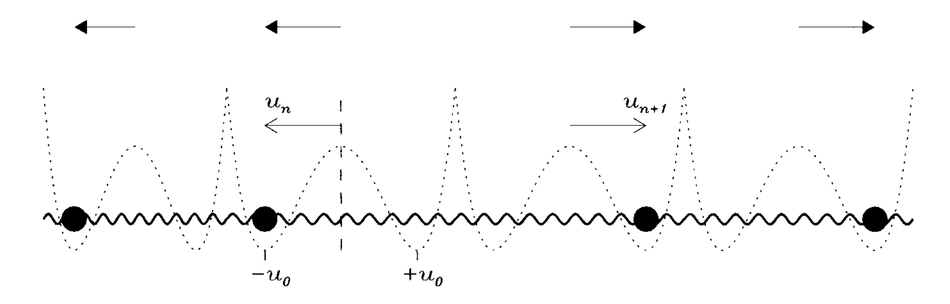


FIG. 10.6 – Représentation schématique du modèle unidimensionnel de ferroélectrique.

voisins qui seraient dans des configurations de polarisations opposées $\pm u_0$: $V_0 \gg \frac{1}{2}C(-u_0 - u_0)^2 = 2Cu_0^2$. Au contraire, lorsque le couplage est fort, les polarisations de deux mailles voisines différent peu l'une de l'autre et la physique est dominée par les modes de déplacement atomiques de grandes longueurs d'ondes. C'est le cas des ferroélectriques de type déplacement, que nous allons maintenant étudier de manière approfondie.

Pour un couplage fort, on peut utiliser l'approximation des milieux continus qui consiste à remplacer l'ensemble des fonctions discrètes $u_i(t)$ par le champ à deux variables $u(x,t)$. L'hamiltonien (10.2) est donc remplacé par la somme continue suivante :

$$H = \int \frac{\mathrm{d}x}{\ell} \left[\frac{1}{2} m u_t^2 + \frac{1}{2} m c_0^2 u_x^2 + V_0 \left(1 - \frac{u^2}{u_0^2} \right)^2 \right] \quad , \tag{10.3}$$

où l'on note ℓ le pas du réseau et $c_0^2 = C\ell^2/m$ est une constante homogène au carré d'une vitesse dont nous préciserons la signification physique ultérieurement. Le passage de la somme discrète à l'intégrale est réalisé en notant que chacun des termes de la somme (10.2) donne l'énergie d'une maille du réseau. L'énergie par unité de longueur est donc obtenue en divisant par ℓ l'expression de l'un de ces termes (écrite dans la limite des milieux continus). Puis on intègre sur tout l'espace cette densité d'énergie pour obtenir l'hamiltonien (10.3).

10.3 Structure des parois de domaines dans l'approximation des milieux continus

À partir de l'hamiltonien (10.3), il est facile de déterminer l'équation du mouvement des atomes

$$u_{tt} - c_0^2 u_{xx} - \omega_0^2 u \left(1 - \frac{u^2}{u_0^2} \right) = 0 \tag{10.4}$$

en posant $\omega_0^2 = 4V_0/mu_0^2$. Cette quantité correspond à la pulsation de l'oscillation des particules de masse m placées près du minimum du potentiel de substrat.

10.3.1 Les solutions de faible amplitude : les phonons

Les états fondamentaux du système sont obtenus quand les ions sont dans les *minima* du potentiel de substrat situés en $u = \pm u_0$. Considérons tout d'abord les petites oscillations au voisinage du fond du puits en introduisant la variable $u = u_0 + \varepsilon\eta$ avec $\varepsilon \ll 1$. En se limitant aux termes d'ordre ε, on obtient

$$\varepsilon\frac{\partial^2\eta}{\partial t^2} - c_0^2\varepsilon\frac{\partial^2\eta}{\partial x^2} - \omega_0^2(u_0+\varepsilon\eta)\left(1-\frac{(u_0+\varepsilon\eta)^2}{u_0^2}\right) = 0$$

$$\text{i.e.} \qquad \varepsilon\left[\frac{\partial^2\eta}{\partial t^2} - c_0^2\frac{\partial^2\eta}{\partial x^2} + 2\omega_0^2\eta\right] = 0 + \mathcal{O}(\varepsilon^2) \quad . \tag{10.5}$$

Les solutions de l'équation (10.5) sont les ondes planes $\eta = \eta_0\, e^{i(\omega_q t - qx)}$+c.c. de relation de dispersion $\omega_q^2 = 2\omega_0^2 + c_0^2q^2$, qui correspondent aux modes de phonons du cristal ferroélectrique. Cette expression montre que c_0 est la vitesse de phase des phonons dans la limite des grands vecteurs d'ondes.

10.3.2 Les solutions de grande amplitude : structure des parois de domaines ferroélectriques

L'équation (10.4) est, à des facteurs constants près, l'équation du mouvement du modèle ϕ^4 que nous avons introduit au chapitre 2. Il est facile de retrouver la solution à profil constant se déplaçant à la vitesse v par la méthode déjà utilisée pour l'équation de SG. On cherche u sous forme d'une fonction de $z = x - vt$. L'équation se simplifie en

$$-v^2u_{zz} + c_0^2u_{zz} + \omega_0^2u\left(1-\frac{u^2}{u_0^2}\right) = 0 \quad . \tag{10.6}$$

De manière désormais classique, on multiplie par $\mathrm{d}u/\mathrm{d}z$ et on intègre par rapport à la variable z pour obtenir

$$(c_0^2 - v^2)\frac{1}{2}\left(\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}z}\right)^2 - \frac{1}{4}\omega_0^2u_0^2\left(1-\frac{u^2}{u_0^2}\right)^2 = K \quad . \tag{10.7}$$

À grande distance de la paroi de domaine ($|z| \to +\infty$), la polarisation prend l'une de ses deux valeurs d'équilibre soit $u = \pm u_0$ et $\mathrm{d}u/\mathrm{d}z = 0$. La constante K est donc nulle ce qui permet de réécrire l'expression (10.7) de la manière suivante :

$$\frac{1}{u_0^2}\left(\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}z}\right)^2 = \frac{\omega_0^2}{2(c_0^2 - v^2)}\left(1-\frac{u^2}{u_0^2}\right)^2 \quad , \tag{10.8}$$

qui montre que l'on doit nécessairement respecter la condition $v^2 < c_0^2$. On obtient la solution finale par intégration

$$u = \pm u_0 \tanh \frac{\omega_0}{\sqrt{2} c_0 \sqrt{1 - v^2/c_0^2}} (z - z_0) \quad , \tag{10.9}$$

où z_0 est une constante d'intégration qui fixe la position du centre du « kink » (cf. fig. 10.7). Aux constantes près, on retrouve bien la solution (2.84) du modèle ϕ^4 qui représente un passage progressif entre les deux positions $\pm u_0$. La solution soliton de l'équation (10.4) décrit donc une paroi de domaine séparant deux régions de polarisations opposées. L'énergie du matériau est la même dans les deux états de polarisation qui représentent deux états fondamentaux énergétiquement dégénérés dont l'existence pouvait nous laisser prévoir la possibilité d'obtenir des *solitons topologiques.*

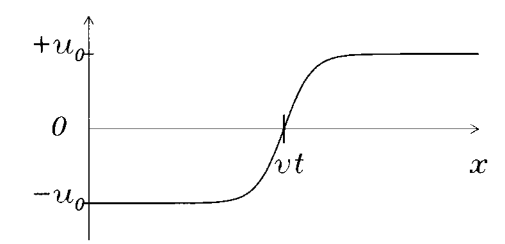


FIG. 10.7 – Représentation de la solution (10.9) (avec le signe +) correspondant à une paroi de domaine.

La largeur L de la paroi de domaine est

$$L = \frac{\sqrt{2} c_0}{\omega_0} \sqrt{1 - \frac{v^2}{c_0^2}} \tag{10.10}$$

qui contient le facteur de contraction de Lorentz vis-à-vis de la vitesse c_0, que nous avions déjà rencontré pour les équations de Klein-Gordon non-linéaires telles de l'équation SG.

Comme le résultat a été obtenu après utilisation de l'approximation des milieux continus, il n'est valable que si la largeur de l'excitation au repos $L_0 = \sqrt{2} c_0/\omega_0 = \ell\sqrt{C u_0^2/2V_0}$ est grande devant le pas du réseau ℓ. Cette condition est réalisée si l'énergie de couplage intersite $4Cu_0^2$ est grande devant la barrière du potentiel de substrat V_0. C'est l'hypothèse de couplage fort que nous avons faite pour les matériaux ferroélectriques de type déplacement, et qui ne s'applique pas à ceux qui sont de type ordre-désordre. En réalité, pour les matériaux réels, même dans le cas des ferroélectriques de type déplacement comme le titanate de baryum, les parois de domaines ont une largeur de seulement quelques mailles. Comme les dislocations, leur énergie potentielle dépend de leur position par rapport au réseau. Elle sont piégées par le potentiel

de PN. Un champ électrique uniforme, qui crée une force dans le même sens sur tous les atomes, peut les mettre en mouvement. Par exemple, un champ dans le sens négatif, qui tend à déplacer les atomes du site $+u_0$ au site $-u_0$ entraîne la paroi dans le sens qui fait grandir le domaine où $u = +u_0$, c'est-à-dire qu'il tend à déplacer dans le sens négatif une paroi telle que celle qui est représentée sur la figure 10.7. Cela correspond à la propriété observée expérimentalement dans les ferroélectriques qu'un champ électrique tend à favoriser les domaines qui ont une polarisation dans le sens du champ. Comme les dislocations, les parois de domaines ferroélectriques, qui sont assez étroites, rayonnent de petites oscillations atomiques lorsqu'on les met en mouvement. Cela se traduit par une force de friction effective qui tend à s'opposer à ce mouvement.

Nous avons calculé la solution correspondant à la constante $K = 0$, c'est-à-dire à une paroi unique. Des valeurs différentes de K permettent d'obtenir des solutions qui correspondent à un *réseau de parois*. Comme dans le cas de l'équation de SG, l'équation (10.4) étant non-linéaire, une solution à deux parois ne peut pas être obtenue en sommant simplement deux solutions à une paroi, mais en pratique, comme la solution à une paroi rejoint exponentiellement les valeurs d'équilibre $\pm u_0$ quand on s'éloigne de son centre, l'interaction entre deux parois décroît rapidement avec leur distance. Dès que deux parois sont éloignées l'une de l'autre d'une distance égale à 5 à 10 fois leur largeur, la solution à plusieurs parois est pratiquement identique à la superposition de deux solutions à une paroi.

10.3.3 Énergie de paroi

L'énergie d'une paroi est un paramètre important car la structure en domaines du matériau résulte d'un équilibre entre les énergies des parois et la diminution de l'énergie que l'on obtient en mettant des dipôles antiparallèles grâce à l'existence de domaines.

On l'obtient à partir de l'hamiltonien (10.3) en remplaçant les dérivées spatiales et temporelles par leurs expressions en fonction de u_z. On a :

$$H = \frac{m}{2\ell} \int \mathrm{d}x \left[(v^2 + c_0^2) u_z^2 + \frac{1}{2} \omega_0^2 u_0^2 \left(1 - \frac{u^2}{u_0^2} \right)^2 \right] \quad . \tag{10.11}$$

En utilisant l'expression (10.8), on aboutit par conséquent à

$$H = \frac{m}{4\ell} \omega_0^2 u_0^2 \int \mathrm{d}x \left[\frac{v^2 + c_0^2}{c_0^2 - v^2} + \frac{c_0^2 - v^2}{c_0^2 - v^2} \right] \left(1 - \frac{u^2}{u_0^2} \right)^2 \tag{10.12}$$

$$= \frac{m}{2\ell} \omega_0^2 u_0^2 \frac{c_0^2}{c_0^2 - v^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}x \left(1 - \frac{u^2}{u_0^2} \right)^2 \quad . \tag{10.13}$$

Si l'on tient compte de l'expression de la solution soliton il vient

$$H = \frac{m}{2\ell}\omega_0^2 u_0^2 \frac{c_0^2}{c_0^2 - v^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}x \left(\mathrm{sech}^2 \frac{z - z_0}{L}\right)^2 \tag{10.14}$$

$$= \frac{m}{2\ell}\omega_0^2 u_0^2 \frac{c_0^2}{c_0^2 - v^2} L \underbrace{\left[-\frac{1}{3}\tanh^3 Z + \tanh Z\right]_{-\infty}^{+\infty}}_{=4/3} \tag{10.15}$$

$$= \frac{m}{2\ell}\omega_0^2 u_0^2 \frac{c_0^2}{c_0^2 - v^2} \frac{\sqrt{2} c_0 \sqrt{1 - \frac{v^2}{c_0^2}}}{\omega_0} \frac{4}{3} \tag{10.16}$$

ce qui s'exprime sous la forme

$$H = \frac{Mc_0^2}{\sqrt{1 - v^2/c_0^2}} \qquad \text{où} \qquad M = \frac{2\sqrt{2}}{3}\frac{\omega_0 u_0^2}{c_0\,\ell} m \quad . \tag{10.17}$$

Il apparaît donc, à nouveau, que non seulement l'énergie de la paroi est invariante par translation, puisqu'elle ne dépend pas de la position de son centre z_0, mais qu'en outre, elle s'exprime comme l'énergie d'une particule relativiste de masse M. Cela est tout à fait en accord avec les multiples caractères de pseudo-particule des solitons dont la vitesse limite est, comme nous l'avons vu, la vitesse c_0. Leur largeur L montrait déjà la contraction « relativiste ».

Le soliton décrivant une paroi de domaine dans un matériau ferroélectrique est un exemple de soliton microscopique directement observable, puisqu'à très basse température, les parois sont bien séparées les unes des autres. On peut visualiser les domaines d'un cristal ferroélectrique et même observer les mouvements de parois induits par un champ électrique extérieur.

10.4 Réponse diélectrique d'un matériau ferroélectrique

Lorsque l'on étudie les matériaux ferroélectriques, on s'intéresse à leur fonction de réponse diélectrique, c'est-à-dire à la façon dont ils se polarisent sous l'action d'un champ extérieur. Comme nous l'avons vu, cette polarisation résulte de déplacements d'ions dans le matériau. Le modèle unidimensionnel que nous avons introduit permet non seulement de prévoir l'allure de la réponse diélectrique mais également de mettre en évidence le rôle essentiel que jouent les solitons pour expliquer certaines de ses composantes.

Considérons le système dans un état quelconque, tel que celui de la figure 10.6 pour fixer les idées. Supposons qu'il soit soumis à un champ électrique $E(t)$ de pulsation ω (dans ce modèle unidimensionnel la seule composante du champ que nous pouvons considérer est la composante parallèle à

l'axe de la chaîne, qui est aussi la direction des déplacements ioniques décrits par le modèle). Le champ va induire un mouvement des particules chargées,

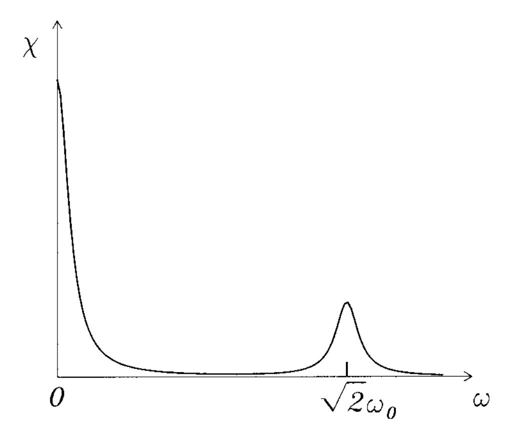


FIG. 10.8 – Schéma de la réponse diélectrique (susceptibilité χ) d'un matériau ferroélectrique en fonction de la fréquence d'excitation ω.

mais selon la valeur de sa fréquence, la réponse du système sera totalement différente. On peut prévoir *a priori* deux types de réponses :

(i) Une réponse importante au voisinage de la fréquence des oscillations des particules autour de leur position d'équilibre en $\pm u_0$, c'est-à-dire due aux phonons que nous avons décrits dans la section 10.3.1. Les fréquences correspondantes, de l'ordre de 10^{13} Hz, correspondent à des ondes électromagnétiques dans l'infra-rouge lointain dont la longueur d'onde est très supérieure au paramètre de la maille cristalline. On excite donc des modes de phonons de vecteur d'onde très faible, dont la résonance se situe à la fréquence $\sqrt{2}\omega_0$. C'est ce qui explique le pic à cette fréquence sur la figure 10.8.

(ii) Si le système possède des solitons mobiles, une excitation de basse fréquence va induire une forte réponse correspondant à leur déplacement sous l'effet du champ. Plus la fréquence ω est basse, plus le soliton parcourt un grand chemin avant de changer de sens de déplacement, induisant des polarisations dans le sens du champ sur de très grandes régions. Cela génère un « pic central » très intense dans la susceptibilité, au voisinage de la fréquence nulle (cf. fig. 10.8). Ce pic central, observé expérimentalement, était resté sans explication satisfaisante jusqu'à ce que le rôle des solitons soit envisagé. Les analyses qui étaient avancées auparavant reposaient sur une diffusion statique par des défauts, qui, bien qu'elle contribue sans doute, ne pouvait expliquer la forme du pic en fonction de ω. Aussi bien les solitons que les antisolitons, correspondant aux signes plus ou moins dans l'expression (10.9), apportent une contribution au pic

central. Sous l'effet d'un champ, les deux excitations se déplacent dans des sens opposés, mais toujours de façon à faire croître les domaines où la polarisation est dans le sens du champ.

Ce modèle finalement relativement simple, permettant de décrire les parois de domaines dans les ferroélectriques, présente néanmoins une contradiction apparente. En effet, nous avons indiqué que les parois de domaines étaient piégées par les effets de réseau mais nous interprétons le pic central par la mobilité de ces parois. Comment surmonter cette contradiction ? L'explication vient des effets de la température dont nous n'avons pas encore tenu compte. Les fluctuations thermiques, qui échangent avec les quasi-solitons des énergies de l'ordre de grandeur de la barrière de PN, permettent aux parois d'être mobiles près de la température critique T_c alors qu'elles sont piégées à basse température.

10.5 La thermodynamique d'un système non-linéaire

10.5.1 La fonction de corrélation

Lorsque l'on écrit l'équation (10.4) qui nous a permis d'obtenir la solution soliton (10.9), on traite le système comme s'il était isolé alors qu'en réalité il est en contact avec un milieu extérieur à une température T. L'équation que nous avons résolue ne tient pas compte de ce thermostat, et c'est la raison pour laquelle on dit que l'on a étudié le système à température nulle.

Pour obtenir des résultats susceptibles d'être comparés à des données expérimentales, il faut absolument tenir compte du rôle du bain thermique responsable de l'apparition de fluctuations dans les mouvements atomiques. La réponse à un champ extérieur, que l'on mesure dans une expérience macroscopique, comme par exemple la réalisation d'un spectre infra-rouge ou Raman, n'est pas déterminée par les positions atomiques instantanées mais par des *moyennes statistiques* de ces positions ou de leurs variations.

Contrairement au cas des systèmes macroscopiques que nous avions étudiés dans la première partie, au niveau microscopique, dans un solide ou une macromolécule, les fluctuations thermiques mettent en jeu des énergies qui sont du même ordre de grandeur que les énergies associées aux solitons et à leur dynamique. Leur rôle ne peut être ignoré. Elles peuvent, par exemple, générer un mouvement des solitons en les faisant avancer ou reculer d'une maille lorsqu'une fluctuation favorable aide une particule à franchir une barrière de potentiel. Ceci explique donc de manière simple comment des parois de domaines, bloquées par des effets de réseau à basse température, peuvent devenir mobiles à haute température. Dans le cas des températures non nulles, le soliton a un mouvement de diffusion, très semblable à celui d'une particule brownienne, sous l'effet des fluctuations des particules du réseau.

L'analyse de la réponse d'un système à un champ extérieur par la théorie de la réponse linéaire montre qu'elle s'exprime à partir des fonctions de corrélation du déplacement,

$$C_{uu}(x,t,x_0,t_0) = \langle u(x_0,t_0)\, u(x_0+x,t_0+t)\rangle \quad , \tag{10.18}$$

où le signe $\langle . \rangle$ signifie la valeur moyenne statistique sur un grand nombre de systèmes identiques, à la même température T, mais avec des fluctuations instantanées évidemment différentes. Dans le cas d'un système homogène spatialement et temporellement, la moyenne ne dépend pas des variables x_0 et t_0 mais uniquement des variables x et t : nous la noterons par conséquent $C_{uu}(x,t)$.

La fonction de réponse diélectrique, ainsi que les données de diffusion de neutrons ou de lumière, s'expriment en fonction du facteur de structure dynamique $S(q,\omega)$ qui est la transformée de Fourier de la fonction de corrélation :

$$S(q,\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}x \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}t\; C_{uu}(x,t)\; e^{i(\omega t - qx)} \tag{10.19}$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}x \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}t\; \langle u(0,0)\, u(x,t)\rangle\; e^{i(\omega t - qx)} \tag{10.20}$$

puisque la fonction de corrélation est indépendante du choix de x_0 et t_0. Ainsi, la fonction de corrélation (ou sa transformée de Fourier) contient l'essentiel des informations que l'on peut chercher à obtenir sur le cristal ferroélectrique en contact avec un thermostat à la température T. Il « suffit » donc de savoir calculer la moyenne statistique $\langle u(0,0)\, u(x,t)\rangle$. Nous allons examiner différentes façons de faire ce calcul.

10.5.2 Le modèle du gaz de solitons

La première méthode, qui n'est qu'approchée mais cependant très performante, utilise le fait que le système possède des solutions solitons. Comme nous l'avons vu à propos de la réponse diélectrique, les fluctuations qui interviennent dans le calcul de la fonction de corrélation $\langle u(0,0)\, u(x,t)\rangle$ sont de deux sortes :

(i) les petites vibrations autour des positions d'équilibre $\pm u_0$;

(ii) les mouvements des solitons.

La contribution (i) peut être déterminée facilement en supposant les vibrations suffisamment faibles pour utiliser l'approximation harmonique.

Le calcul de la contribution (ii) est *a priori* nettement plus difficile, mais on peut utiliser les propriétés exceptionnelles de stabilité des solitons que l'on peut donc considérer comme des « quasi-particules » formant un « gaz » de solitons dont on peut déterminer les propriétés thermodynamiques car on sait calculer l'énergie des solitons en fonction de leur vitesse. Comme le gaz est unidimensionnel, nous avons vu dans la section 2.4.1 qu'il existe une

contrainte topologique liée à la forme du potentiel qui impose qu'un soliton est nécessairement suivi par un antisoliton : ils ne peuvent pas se croiser mais seulement se réfléchir dans des collisions. On doit donc considérer un gaz de particules, identifiables individuellement, c'est-à-dire un gaz classique. Il faut connaître la densité moyenne de solitons à la température T, que l'on déterminera grâce au facteur de Boltzmann e^{-E/k_BT}. La relation énergie-vitesse (10.17) permet ensuite d'obtenir la distribution des vitesses à une température donnée.

Montrons que l'on a toutes les informations pour calculer les fonctions de corrélation sur l'exemple du produit $u_k u_p$ de deux déplacements au même instant t_0. Dans cette approche on ne tient pas compte de la forme exacte des solitons dont on suppose la largeur assez petite pour que l'on puisse considérer que les particules occupent l'un ou l'autre des deux *minima* de potentiel $u = \pm u_0$. C'est, bien entendu, une approximation, mais la figure 10.9, dans un cas réaliste, montre qu'elle est assez bien vérifiée. Elle est d'autant meilleure que l'on est à basse température, avec une densité faible de solitons, car il y alors très peu de particules dans le cœur des solitons où u passe d'un minimum de potentiel à l'autre.

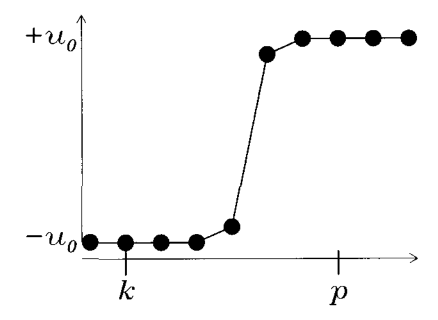


FIG. 10.9 – Configuration particulière du système dans lequel on distingue un soliton, situé entre les deux sites k et p.

Les valeurs du produit $u_k u_p$ peuvent donc être :
- u_0^2 s'il n'y a pas de solitons entre les sites k et p ;
- $-u_0^2$ s'il y a au contraire un seul soliton entre les deux sites k et p ;
- u_0^2 s'il y a deux solitons ;
- etc.

Comme il est possible de calculer la probabilité de présence d'un soliton sur la longueur ℓ qui sépare les sites k et p à partir de l'énergie du soliton, on pourra affecter une probabilité à chacune des situations répertoriées ci-dessus, et donc calculer la corrélation $\langle u_k u_p \rangle$.

Par un raisonnement tout à fait analogue, on peut calculer la fonction de corrélation $\langle u_k(0)u_p(t) \rangle$ à partir de la corrélation $\langle u_k(0)u_p(0) \rangle$. En effet, la valeur de l'amplitude $u_p(t)$ sera égale à $u_p(0)$, sauf si un soliton passe sur le

site p pendant l'intervalle de temps t. Si c'est le cas, il faut alors basculer la particule p dans l'autre minimum du potentiel. Il suffit par conséquent de calculer la probabilité de passage d'un soliton en p pendant la durée t à partir de la densité de solitons et de leur vitesse moyenne.

Ces exemples montrent comment l'on peut calculer les fonctions de corrélations en raisonnant sur un gaz de solitons. Ils illustrent la façon dont le concept de soliton renouvelle complètement la manière d'aborder le problème de mécanique statistique du système non-linéaire.

10.5.3 La méthode de l'intégrale de transfert

Pour un système unidimensionnel comme le modèle de ferroélectrique que nous considérons, il est possible d'étudier les propriétés thermodynamiques par une méthode plus exacte que celle du gaz de solitons, qui est non seulement très élégante mais aussi très générale. Elle permet de calculer la fonction de partition du système, dont on peut tirer toutes les propriétés thermodynamiques. Dans le cas du modèle ϕ^4 pour les ferroélectriques, cette méthode, dite *méthode de l'intégrale de transfert*, a été développée par Krumhansl et Schrieffer [87].

Dans l'ensemble canonique la **fonction de partition** d'une chaîne de N particules d'hamiltonien H fonction des $2N$ variables (p_n, u_n), où p_n correspond à la quantité de mouvement conjuguée de la position u_n, s'écrit

$$Z = \int \prod_{n=1}^{N} \mathrm{d}p_n \mathrm{d}u_n \, e^{-\beta H} \quad , \tag{10.21}$$

où l'on a introduit $\beta = 1/(k_B T)$ et où $\prod \mathrm{d}p_n \mathrm{d}u_n$ indique que l'on doit intégrer sur toutes les variables de quantités de mouvement et de positions de la chaîne.

Pour que cette quantité soit convenablement définie, il faut préciser les conditions aux limites que l'on choisit. À la limite thermodynamique $N \to \infty$, ces conditions ne jouent pas de rôle dans la thermodynamique et on peut retenir celles qui sont les plus commodes pour le calcul. Nous choisirons des conditions aux limites périodiques en imposant que le déplacement de la particule $N+1$ est identique à celui de la particule 1, ce que l'on peut traduire mathématiquement en introduisant la distribution de Dirac $\delta(u_{N+1} - u_1)$ dans l'expression de la fonction de partition *via* $\int \mathrm{d}u_{N+1} \, \delta(u_{N+1} - u_1) = 1$. Compte tenu de la forme de l'hamiltonien (10.2), la fonction de partition s'écrit :

$$Z = \int \prod_{n=1}^{N} \mathrm{d}p_n e^{-\beta \frac{p_n^2}{2m}} \int \prod_{n=1}^{N+1} \mathrm{d}u_n \, e^{-\beta \sum_{n=1}^{N} \left[\frac{C}{2}(u_{n+1} - u_n)^2 + V(u_n) \right]} \times \delta(u_{N+1} - u_1) \quad . \tag{10.22}$$

La partie cinétique s'intègre directement et donne $(2\pi m k_B T)^{N/2}$ alors que l'intégrale multiple portant sur les u_n, qui forme la partie configurationnelle

que nous noterons Z_u, peut sembler difficile voire impossible à calculer. En fait, grâce au caractère unidimensionnel du modèle et au couplage limité aux plus proches voisins, le calcul est possible en introduisant un opérateur auxiliaire qui est *l'opérateur de transfert.*

En posant $R(u_n, u_{n+1}) = \frac{C}{2}(u_{n+1} - u_n)^2 + V(u_n)$, on peut réécrire l'expression (10.22) de la manière suivante :

$$Z_u = \int du_{N+1} \prod_{n=1}^{N} \mathrm{d}u_n \; e^{-\beta R(u_n, u_{n+1})} \; \delta(u_{N+1} - u_1) \quad . \tag{10.23}$$

La méthode de l'intégrale de transfert consiste à introduire un opérateur $T(y, y')$, agissant sur un espace de fonctions $f(y)$, défini par la relation

$$T(y, y')f(y') = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}y' \; e^{-\beta R(y,y')} \; f(y') = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}y' \; K(y, y') \; f(y') \quad , \tag{10.24}$$

où $K(y, y') = e^{-\beta R(y,y')}$ constitue le noyau de l'opérateur intégral. L'idée est tout à fait analogue à celle utilisée dans la résolution du modèle d'Ising par la méthode de la matrice de transfert. Le résultat de l'action de l'opérateur sur une fonction de y' est une autre fonction, dépendant de la variable y.

On peut définir alors les fonctions propres $\varphi_q(y)$ de l'opérateur, associées aux valeurs propres λ_q, par

$$T(y, y') \, \varphi_q(y') = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}y' \; K(y, y') \, \varphi_q(y') = \lambda_q \varphi_q(y) \quad . \tag{10.25}$$

L'ensemble de ces fonctions propres de l'opérateur de transfert forme une base orthonormée de l'espace des fonctions[1] sur laquelle on peut développer

1. En toute rigueur cette affirmation n'est vraie que pour des opérateurs symétriques $T(y, y') = T(y', y)$. L'opérateur que nous avons défini n'est pas symétrique car $R(y, y') = \frac{C}{2}(y' - y)^2 + V(y)$ n'est pas symétrique en y et y'. Si l'on désire conserver l'opérateur non symétrique, ce qui est commode pour certains des calculs qui vont suivre, on peut définir deux types de fonction propres, φ_q « à droite » définies par $T(y, y') \, \varphi_q(y') = \lambda_q \varphi_q(y)$ et φ_q^*, « à gauche », définies par $T(y, y') \, \varphi_q^*(y) = \lambda_q \varphi_q^*(y')$. La condition d'orthogonalité des fonctions propres est $\int \varphi_q^*(y) \varphi_{q'}(y) \mathrm{d}y = \delta(q - q')$.
Quand on veut effectuer des calculs numériques avec l'opérateur de transfert, il est en revanche intéressant de passer à un opérateur symétrique, ce qui permettra, après discrétisation de l'espace pour le calcul numérique, d'utiliser des programmes traitant des matrices symétriques. On peut symétriser l'opérateur que nous avons introduit en définissant $R_1(y, y') = \frac{C}{2}(y' - y)^2 + \frac{1}{2}V(y) + \frac{1}{2}V(y')$. On fait apparaître cette forme symétrisée dans l'équation qui définissait les valeurs propres de l'opérateur non symétrique par :

$$\int \mathrm{d}y' \exp[-\beta R(y, y')] \varphi_q(y') = \int \mathrm{d}y' \exp[-\beta R_1(y, y')] \; \exp[-\beta V(y)/2] \; \exp[+\beta V(y')/2] \; \varphi_q(y') = \lambda_q \varphi_q(y) \; .$$

En multipliant cette équation par $\exp[+\beta V(y)/2]$ on obtient une nouvelle équation aux valeurs propres pour un opérateur de transfert symétrisé

$$\int \mathrm{d}y' \exp[-\beta R_1(y, y')] \; \phi_q(y') = \lambda_q \phi_q(y) \quad ,$$

avec de nouvelles fonctions propres $\phi_q(y) = \exp[+\beta V(y)/2] \; \varphi_q(y)$, mais des valeurs propres inchangées.

$\delta(u_{N+1} - u_1)$ en

$$\delta(u_{N+1} - u_1) = \sum_q \varphi_q^*(u_{N+1})\varphi_q(u_1) \quad , \tag{10.26}$$

dans laquelle nous avons utilisé une notation condensée pour la sommation sur l'indice q des valeurs propres, qui dans le cas général peut comporter des valeurs discrètes et un continuum.

La définition de l'opérateur de transfert et le développement (10.26) permettent de réécrire la partie configurationnelle Z_u de la fonction de partition sous la forme

$$Z_u = \int \mathrm{d}u_{N+1} \ldots \mathrm{d}u_1 \left[\sum_q \varphi_q^*(u_{N+1})\varphi_q(u_1)\right] K(u_{N+1}, u_N) \ldots K(u_2, u_1) \quad . \tag{10.27}$$

Si l'on effectue tout d'abord l'intégration sur la variable u_1, on aboutit à

$$Z_u = \sum_q \int \mathrm{d}u_{N+1} \ldots \mathrm{d}u_2 \, \varphi_q^*(u_{N+1}) K(u_{N+1}, u_N) \ldots K(u_3, u_2) \underbrace{\int \mathrm{d}u_1 K(u_2, u_1)\varphi_q(u_1)}_{=\lambda_q \varphi_q(u_2)} \tag{10.28}$$

$$= \sum_q \lambda_q \int \mathrm{d}u_{N+1} \ldots \mathrm{d}u_2 \varphi_q^*(u_{N+1}) K(u_{N+1}, u_N) \ldots K(u_3, u_2) \; \varphi_q(u_2) \quad . \tag{10.29}$$

En effectuant de manière successive les intégrations sur les u_2, puis u_3, jusqu'à u_N, on progresse le long des indices de la chaîne (d'où le nom d'intégrale de transfert) et on aboutit à

$$Z_u = \sum_q \lambda_q^N \int \mathrm{d}u_{N+1} \, \varphi_q^*(u_{N+1})\varphi_q(u_{N+1}) \tag{10.30}$$

$$= \sum_q \lambda_q^N \quad , \tag{10.31}$$

en utilisant la normalisation des fonctions propres $\int \varphi_q^*(y)\varphi_q(y)\mathrm{d}y = 1$.

Dans la limite thermodynamique correspondant à la limite N tendant vers l'infini, la somme est dominée par la plus grande valeur propre λ_0 de

l'opérateur de transfert. En rassemblant la partie cinétique et la partie configurationnelle, on parvient alors à la fonction de partition du modèle sous la forme

$$Z = \left(\sqrt{2\pi m k_B T}\right)^N \; \lambda_0^N \tag{10.32}$$

dont l'on tire l'**énergie libre**

$$F = -k_B T \ln Z \tag{10.33}$$

$$= -\frac{N k_B T}{2} \ln (2\pi m k_B T) + N\varepsilon_0 \quad , \tag{10.34}$$

en utilisant la notation $\lambda_q = e^{-\beta\varepsilon_q}$.

On peut, par une méthode similaire, obtenir l'expression de la valeur moyenne $\langle u \rangle$ qui est le **paramètre d'ordre** pour la transition ferroélectrique-paraélectrique. Pour cela on peut remarquer qu'avec les conditions aux limites périodiques tous les sites du réseau sont équivalents, soit :

$$\langle u \rangle = \langle u_n \rangle = \langle u_{N+1} \rangle \tag{10.35}$$

$$= \frac{1}{Z} \int \prod_{n=1}^{N} \mathrm{d}p_n \mathrm{d}u_n \; u_{N+1} \, e^{-\beta H} \quad . \tag{10.36}$$

Dans cette expression, les intégrales sur les p_n figurant au numérateur et dans l'expression de Z au dénominateur se simplifient. Le calcul de la partie configurationnelle du numérateur est exactement identique à celui que nous venons de faire pour Z_u, au facteur u_{N+1} près. Il se réalise donc exactement de la même manière et on obtient :

$$\langle u \rangle = \frac{1}{Z_u} \sum_q \lambda_q^N \int \mathrm{d}u_{N+1} \, \varphi_q^*(u_{N+1}) \varphi_q(u_{N+1}) \, u_{N+1} \tag{10.37}$$

$$= \frac{\sum_q \lambda_q^N \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}u \; |\varphi_q(u)|^2 \; u}{\sum_q \lambda_q^N} \quad . \tag{10.38}$$

À la limite thermodynamique les sommes sont dominées par le terme contenant la plus grande valeur propre λ_0, et il ne reste que :

$$\langle u \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}u \, \varphi_0^*(u) \; \varphi_0(u) \, u \quad . \tag{10.39}$$

Cette expression donne un sens à la fonction propre de l'opérateur de transfert associée à sa plus grande valeur propre. On voit que $\varphi_0^*(u)\varphi_0(u)$ représente le poids qu'il faut affecter à chaque valeur de u pour calculer la valeur moyenne statistique $\langle u \rangle$.

La même méthode peut être utilisée pour calculer les fonctions de corrélations statiques $\langle u_k u_p \rangle$. On peut en obtenir une expression analytique qui fait intervenir une somme dans laquelle entrent toutes les valeurs propres de l'opérateur de transfert, même à la limite thermodynamique. En pratique, comme il est rarement possible d'obtenir l'ensemble du spectre de l'opérateur de transfert, la méthode ne peut être menée analytiquement jusqu'au bout bien que des expressions approchées puissent être obtenues. Cela renforce l'intérêt de l'approche du « gaz de solitons » qui tire profit de la connaissance des excitations non-linéaires du système.

10.5.4 Détermination du spectre de l'opérateur de transfert

Malgré les limites que nous venons de signaler, la méthode de l'opérateur de transfert reste très intéressante car elle fournit des résultats exacts pour la thermodynamique du modèle unidimensionnel, pourvu tout au moins que l'on puisse obtenir la plus grande valeur propre de l'opérateur de transfert (ou la plus petite valeur de ε_q si l'on utilise la notation $\lambda_q = \exp[-\beta\varepsilon_q]$) et la fonction propre φ_0 correspondante. Ce calcul est toujours possible de façon numérique mais analytiquement, il n'est possible que dans le cas du couplage fort, c'est-à-dire dans la limite des milieux continus.

On se propose de résoudre l'équation aux valeurs propres (10.25), qui, après substitution du noyau par son expression, devient

$$I = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}y' \, \varphi(y') \, e^{-\beta\left[\dfrac{C}{2}(y'-y)^2 + V(y)\right]} = e^{-\beta\varepsilon}\, \varphi(y) \quad , \tag{10.40}$$

dans laquelle l'indice q de la fonction propre a été omis. Dans le cas d'un couplage fort, le terme $C(y'-y)^2$ croît rapidement dès que $y' \neq y$. Comme il figure dans l'exponentielle avec un signe négatif, la contribution à l'intégrale des valeurs de y' très différentes de y est très faible. On peut en tirer parti en effectuant un développement de Taylor de $\varphi(y')$ autour de la valeur $y' = y$. On obtient :

$$I = e^{-\beta V(y)} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}y' \left[\sum_{n=0}^{+\infty} \frac{\varphi^{(n)}(y)}{n!}(y'-y)^n\right] e^{-\beta\dfrac{C}{2}(y'-y)^2} \tag{10.41}$$

$$= e^{-\beta V(y)} \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{\varphi^{(n)}(y)}{n!} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}y' \, (y'-y)^n \, e^{-\beta\dfrac{C}{2}(y'-y)^2} \tag{10.42}$$

$$= e^{-\beta V(y)} \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{\varphi^{(2n)}(y)}{(2n)!} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}y' \, (y'-y)^{2n} \, e^{-\beta\dfrac{C}{2}(y'-y)^2} \quad , \tag{10.43}$$

puisque les intégrales des fonctions impaires s'annulent. En effectuant les intégrales gaussiennes, on obtient :

$$I = e^{-\beta V(y)} \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{\varphi^{(2n)}(y)}{(2n)!} \sqrt{\frac{2\pi}{\beta C}} \frac{(2n-1)(2n-3)\cdots 3\cdot 1}{(\beta C)^n} \tag{10.44}$$

$$= e^{-\beta V(y)} \sqrt{\frac{2\pi}{\beta C}} \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{\varphi^{(2n)}(y)}{(2n)(2n-2)\cdots 4\cdot 2} \frac{1}{(\beta C)^n} \tag{10.45}$$

$$= e^{-\beta V(y)} \sqrt{\frac{2\pi}{\beta C}} \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{1}{n!(2\beta C)^n} \frac{\mathrm{d}^{2n}\varphi(y)}{\mathrm{d}y^{2n}} \quad . \tag{10.46}$$

En reconnaissant la somme comme un opérateur agissant sur $\varphi(y)$, que l'on peut écrire comme le développement d'une exponentielle d'opérateur, on aboutit à l'expression :

$$I = e^{-\beta V(y)} \sqrt{\frac{2\pi}{\beta C}} \; e^{\frac{1}{2\beta C}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}y^2}} f(y) \quad . \tag{10.47}$$

En définissant s_0 tel que $\exp(-\beta s_0) = \sqrt{2\pi/(\beta C)}$ et en regroupant les équations (10.40) et (10.47), on obtient

$$I = e^{-\beta\left[-\frac{1}{2\beta^2 C}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}y^2} + s_0 + V(y)\right]} \varphi(y) \simeq e^{-\beta\varepsilon} \varphi(y) \quad , \tag{10.48}$$

en négligeant le commutateur[2]. La fonction $\varphi(y)$ est donc solution de l'équation

$$-\frac{1}{2\beta^2 C}\frac{\mathrm{d}^2 f(y)}{\mathrm{d}y^2} + V(y)f(y) = (\varepsilon - s_0)\, f(y) \quad , \tag{10.49}$$

qui correspond à une équation de Schrödinger pour une particule dans le potentiel de substrat $V(u)$ avec, comme préfacteur de la dérivée spatiale, $1/(\beta^2 C)$ au lieu de $\hbar^2/m$.

Ainsi, dans le cas du couplage fort où la limite des milieux continus est valable, la détermination des propriétés thermodynamiques du modèle unidimensionnel de ferroélectrique se réduit formellement à la recherche de l'état fondamental d'une particule quantique, de masse $m^* = \hbar^2 C/[(k_B T)^2]$, placée dans un potentiel double puits.

Bien que la solution exacte de ce problème ne soit pas connue pour le potentiel non-linéaire $V(y)$ du modèle de ferroélectrique, il est facile de faire des prévisions sur le résultat à partir de quelques connaissances de base en mécanique quantique.

2. Lorsque deux opérateurs C et D commutent avec leur commutateur $[C, D]$, on a l'égalité $e^C\, e^D = e^{C+D}\, e^{[C,D]/2}$.

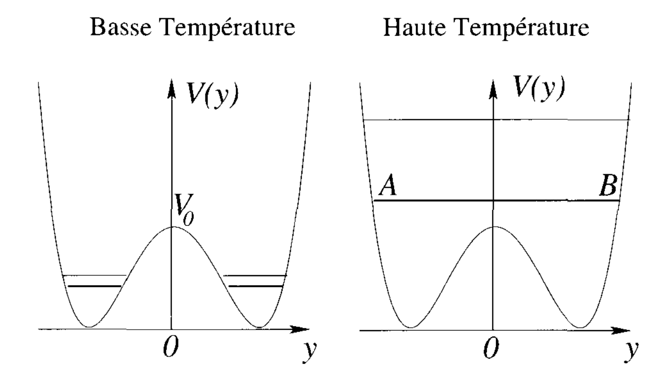


FIG. 10.10 – Aspect des niveaux d'énergie du pseudo-problème de Schrödinger associé à la recherche des valeurs propres de l'opérateur de transfert du modèle unidimensionnel de ferroélectrique dans les régimes haute et basse température. Dans chaque cas, le trait fort indique le niveau d'énergie qui intervient dans l'expression de la fonction de partition.

Sans calcul, on peut déjà faire des prévisions qualitatives. À basse température, la masse effective de la particule m^* est très grande. On s'attend donc à ce que son niveau fondamental d'énergie soit très proche du minimum du potentiel $V(y)$, et donc très inférieur à la barrière de potentiel V_0 (cf. fig. 10.10). Dans ce cas, la « fonction d'onde » $\varphi_0(y)$ correspondante aura des maxima au voisinage des *minima* de potentiel $y = \pm u_0$ et sera au contraire quasiment nulle pour $y \simeq 0$. Or, nous avons montré que $|\varphi_0|^2$ déterminait le poids de chaque valeur de u quand on calcule $\langle u \rangle$. Donc, à basse température, seules les valeurs de u voisines de $\pm u_0$ sont peuplées significativement dans la moyenne statistique. Cela correspond bien à la phase ferroélectrique où le matériau a une polarisation spontanée soit dans un sens soit dans l'autre.

Au contraire, à haute température, la masse effective m^* étant devenue très faible, on s'attend, pour la pseudo-particule quantique, à un niveau d'énergie qui soit très supérieur à la hauteur V_0 de la barrière. La fonction d'onde correspondante aura encore de légers maxima autour des valeurs $y = \pm u_0$ mais elle sera aussi assez grande dans toute la gamme de valeurs situées entre les points A et B sur la figure 10.10, en particulier autour de $u = 0$. L'interprétation statistique de $|\varphi_0|^2$ indique que le système est dans un état où, dans de nombreuses mailles, les atomes ne sont pas au voisinage des *minima* de potentiel. Compte tenu des excitations possibles du système, qui sont soit des phonons soit des parois de domaine, le calcul par l'intégrale de transfert prévoit une forte agitation thermique des particules, mais également la création de nombreuses parois de domaine quand le matériau est à haute température.

L'évaluation de la fonction de partition ne met pas en évidence de changement qualitatif de comportement à une température critique bien définie,

c'est-à-dire qu'elle ne prévoit pas la transition de phase ferroélectrique-paraélectrique, mais seulement une diminution progressive de la polarisation spontanée au fur et à mesure que la température augmente. Ce n'est pas étonnant car, pour ce système unidimensionnel avec des interactions à courte portée, la physique statistique [90] indique que l'on ne doit pas s'attendre à une transition de phase[3].

Bien que le calcul exact des niveaux d'énergie dans le potentiel $V(y)$ ne soit pas possible, on peut cependant obtenir des résultats quantitatifs pour l'énergie libre du modèle en utilisant les méthodes d'approximation de la mécanique quantique, en particulier dans le domaine des basses températures [87]. Dans le domaine correspondant à la phase ferroélectrique, on peut déterminer quantitativement l'énergie du niveau fondamental par un calcul en deux étapes. Comme on prévoit qu'il sera voisin du minimum de $V(y)$ puisque m^* est très grande à basse température, on détermine une première approximation du niveau fondamental $E_0 = \varepsilon_0 - s_0$ en utilisant un développement harmonique de $V(y)$ autour d'un de ses *minima*. De plus on sait que, dans un tel potentiel double puits, on doit s'attendre à un dédoublement du niveau fondamental par effet tunnel. En effet, si la barrière V_0 était infiniment haute, on aurait deux puits totalement séparés et identiques et donc on aurait deux états quantiques identiques pour une particule située dans un puits ou dans l'autre. Mais on sait que, pour une valeur finie de V_0, une particule quantique peut passer d'un puits de potentiel à l'autre par effet tunnel. Ce couplage entre les deux puits lève la dégénérescence des niveaux [36]. Le niveau d'énergie E_0 est remplacé par les deux niveaux $E_0 \pm t_0$, ou $2t_0$ représente le « dédoublement tunnel » qui peut être obtenu par l'approximation WKB de la mécanique quantique [87]. Seul le niveau le plus bas intervient dans l'expression de la fonction de partition et de l'énergie libre donnée par l'équation (10.33) avec $\varepsilon_0 = s_0 + E_0 - t_0$.

Ainsi, l'utilisation des méthodes d'approximation de la mécanique quantique permet d'obtenir, avec une bonne précision, une expression quantitative de l'énergie libre du modèle unidimensionnel de ferroélectrique. Cependant, bien que fournissant une *valeur* pour l'énergie libre, elle ne donne pas son *interprétation physique.* On ne sait pas quelles sont les propriétés du système responsables de tel ou tel terme dans l'expression que l'on obtient. Pour faire cette analyse il faut comparer l'expression obtenue à ce que peuvent donner d'autres méthodes. Une autre approche possible pour étudier la thermodynamique du modèle consiste à chercher quelles sont les excitations possibles du système, et à évaluer leur contribution à l'énergie libre. Nous avons vu qu'il y a deux catégories d'excitations, les phonons et les solitons. Pour évaluer la contribution des phonons on peut travailler dans l'approximation harmonique en considérant que les particules restent au voisinage du minimum de potentiel, et ne retenir qu'un développement harmonique du potentiel. Le calcul

3. Nous verrons cependant au chapitre 15, qu'un autre système unidimensionnel que l'on peut étudier par le même formalisme a bien une transition de phase.

montre alors que la contribution des phonons à l'énergie libre correspond au terme E_0 que donne l'opérateur de transfert [87]. Cela peut se comprendre puisque ce terme a justement été obtenu en faisant l'approximation que $V(y)$ était harmonique. Le calcul de la contribution des solitons est *a priori* plus délicat, mais nous avons déjà vu comment on pouvait l'effectuer : on utilise la méthode du « gaz de solitons » et on exprime l'énergie libre d'un gaz parfait de pseudo-particules dont on connaît la relation entre énergie et vitesse. Le résultat montre que l'on retrouve la contribution t_0 de l'effet tunnel donnée par l'opérateur de transfert [87]. Là aussi, *a posteriori*, c'est un résultat auquel on aurait pu s'attendre. L'effet tunnel résulte de la présence de deux *minima* énergétiquement dégénérés dans le potentiel $V(y)$, or c'est justement la présence de ces deux *minima* qui est responsable de l'existence des solitons topologiques dans le système.

10.5.5 Conclusion

La méthode de l'intégrale de transfert est une méthode très générale de la physique statistique, qui peut s'appliquer en particulier à tout réseau avec un potentiel de substrat non-linéaire et un couplage harmonique entre plus proches voisins. Dans la limite des milieux continus, elle réduit le traitement de la thermodynamique d'un réseau non-linéaire à la résolution d'un problème fictif de mécanique quantique pour une particule dans le potentiel de substrat. Lorsqu'on sait traiter ce problème quantique, on obtient un résultat qui est exact pour le système non-linéaire dans la limite des milieux continus, et nous avons vu que, même quand le problème quantique n'est pas soluble exactement, l'utilisation des méthodes d'approximation de la mécanique quantique peut donner des résultats très satisfaisants.

Nous verrons au chapitre 15 un autre exemple d'application de la méthode de l'intégrale de transfert à un système physique non-linéaire. Cependant la méthode ne conduit pas naturellement à une interprétation physique des résultats quantitatifs qu'elle fournit. Il est très utile de la compléter par d'autres techniques d'analyse. Pour un système ayant des solutions solitons, l'autre approche consiste à profiter des propriétés de quasi-particules des solitons. C'est une méthode particulièrement fructueuse car, outre l'interprétation des résultats de l'intégrale de transfert, elle peut être utilisée pour obtenir des informations sur la dynamique du système (telles que les fonctions de corrélation dynamiques nécessaires pour interpréter les données expérimentales de spectroscopie ou de diffusion de neutrons) que la thermodynamique ne donne pas.

Chapitre 11

Les phases incommensurables

11.1 Exemples en physique des matériaux

Les phases incommensurables apparaissent dans des systèmes où plusieurs périodicités sont en compétition, conduisant à des phénomènes de *frustration*.

Les couches mono-atomiques adsorbées sur des cristaux (c'est le cas du krypton adsorbé sur la surface du graphite) en sont un exemple simple qui a été beaucoup étudié expérimentalement. La structure de l'adsorbat dépend du rapport entre le pas du réseau de graphite (noté b) et la distance a que prendraient les atomes de krypton s'ils n'étaient pas contraints par l'interaction avec le graphite. La valeur de a dépend de la pression dans la phase gazeuse de krypton et de la température qui déterminent la densité surfacique moyenne d'atomes adsorbés.

À basses température et pression de krypton, les atomes se placent dans les minima du potentiel créé par le réseau régulier du graphite, formant des phases « commensurables » accrochées au réseau. En revanche, lorsque la pression de krypton augmente, les atomes de krypton se rapprochent et peuvent s'organiser en une phase dont la périodicité est dans un rapport non entier avec la période du réseau de graphite qui est appelée phase « incommensurable ». Ainsi, en faisant varier la température ou la pression, on peut observer une très grande variété de phases, formant des structures bidimensionnelles complexes.

Cet exemple, qui est le plus simple à décrire et à comprendre, est celui que nous allons étudier dans la suite de ce chapitre. Cependant, les idées que nous allons présenter sont aussi valables pour les nombreux autres systèmes physiques dans lesquels deux longueurs sont en compétition :

- On obtient des structures bidimensionnelles analogues à celles que donnent les gaz adsorbés lorsque des métaux comme le césium s'intercalent dans la structure en couche du graphite.

- On peut obtenir des structures tridimensionnelles, du même type, constituées des atomes de mercure dans le composé $Hg_{3-\delta}AsF_6$. Ils s'organisent en un réseau tridimensionnel incommensurable avec le réseau quadratique de AsF_6.
- Dans certains composés magnétiques contenant des terres rares et dans certains ferroélectriques ($NaNO_2$, $RbLiSO_4$, $(NH_4)_2BeF_4$), les interactions spin-spin ou dipôles-dipôles conduisent à une expression de l'énergie libre contenant des dérivées premières et secondes de l'aimantation ou de la polarisation. Il en résulte que le système peut minimiser son énergie libre en adoptant une structure modulée de l'aimantation ou de la polarisation. En général, la longueur d'onde de modulation dépend de la température et n'est pas commensurable avec la période du réseau cristallin.
- Dans les conducteurs à ondes de densité de charges, la densité électronique est modulée de manière incommensurable avec le réseau cristallin.

11.2 Un modèle unidimensionnel pour l'étude des phases incommensurables : le modèle de Frenkel et Kontorova

Le modèle de Frenkel et Kontorova (FK) (fig. 11.1), déjà rencontré dans l'étude des dislocations au chapitre 9, permet de décrire aussi les phases incommensurables lorsqu'on l'adapte pour tenir compte de l'existence de deux périodes dans le système. Il décrit en effet très bien une couche monoatomique adsorbée sur un cristal.

Le potentiel de substrat sinusoïdal représente l'énergie potentielle d'interaction entre les atomes adsorbés et le cristal. Il a la périodicité b du réseau cristallin. Le potentiel d'interaction entre les atomes est choisi harmonique car on fait l'hypothèse que leur distance restera assez voisine de sa valeur d'équilibre a. Contrairement au cas des dislocations pour lesquelles on avait $a = b$, ici le rapport a/b est quelconque et non nécessairement entier.

Un tel système conduit à une compétition entre deux formes d'énergie : l'énergie élastique d'interaction entre les atomes est minimisée en plaçant les particules à la distance a tandis que l'énergie potentielle de substrat serait minimisée en plaçant les particules à la distance b (ou l'un de ses multiples). On ne peut pas prévoir *a priori* où seront situées les positions d'équilibre des atomes et par conséquent, contrairement au cas des dislocations, on ne peut pas choisir comme coordonnées atomiques les écarts à ces positions d'équilibre. On choisit une origine O, fixée par rapport au potentiel de substrat, à partir de laquelle on repérera la position d'un atome n par sa coordonnée x_n (cf. fig. 11.1).

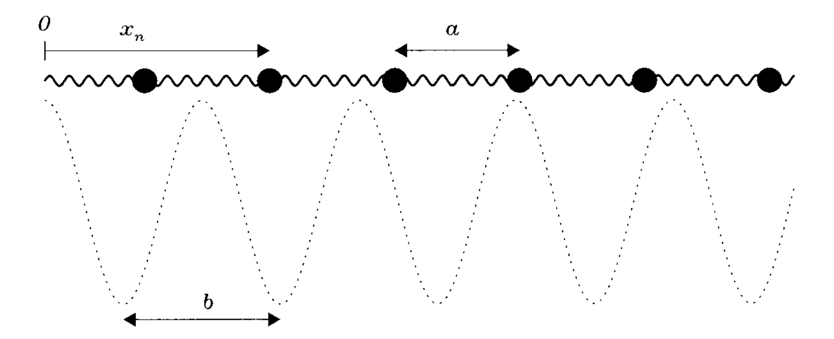


FIG. 11.1 – Représentation schématique du substrat périodique de période b et des atomes adsorbés qui seraient écartés d'une distance a en l'absence du potentiel de substrat.

Dans un premier temps, nous allons nous intéresser uniquement aux structures d'équilibre de ce modèle qui sont déjà très variées. Au lieu de considérer l'hamiltonien comme nous l'avions fait pour les dislocations, on peut se contenter d'étudier l'énergie potentielle du modèle qui s'écrit

$$U = \sum_n \frac{\lambda}{2}(x_{n+1} - x_n - a)^2 + V(x_n) \quad , \tag{11.1}$$

en notant λ la constante de couplage harmonique. Notons que les états d'équilibre ont une énergie cinétique nulle. Il est souvent utile pour les calculs de réécrire cette expression en introduisant la quantité $u_n = x_n - na$ qui mesure la déviation par rapport à la phase que le couplage harmonique imposerait s'il agissait seul. On obtient ainsi :

$$U = \sum_n \frac{\lambda}{2}(u_{n+1} - u_n)^2 + V(u_n + na) \quad . \tag{11.2}$$

La structure à l'équilibre de ce système, est obtenue en minimisant l'énergie potentielle, ce qui conduit au système d'équations non-linéaires couplées suivant :

$$\lambda(u_{n+1} + u_{n-1} - 2u_n) - V'(u_n + na) = 0 \quad . \tag{11.3}$$

11.3 Phases commensurables

Ce sont les phases les plus simples dont la structure est facile à obtenir. Si les deux distances a et b sont égales, ou si a est égal à Mb (M étant un entier), il existe une solution évidente à la minimisation de l'énergie qui consiste à placer toutes les particules exactement en fond de puits. Le réseau de particules forme alors une phase dont la période est commensurable avec la période du potentiel.

Il en sera de même lorsque a et b sont dans un rapport rationnel, $a = (M/N)\,b$, puisque dans ce cas, le système possède la période $Na = Mb$. La structure peut être un peu difficile à déterminer lorsque les deux entiers M et N sont grands, mais on peut l'obtenir de manière exacte. En effet, comme le système est périodique de période Mb, on aura

$$x_{n+N} = x_n + Mb = x_n + Na \quad \text{soit} \quad u_n = u_{n+N} \quad , \tag{11.4}$$

valable pour tout n. Cela implique que l'on a seulement N inconnues à déterminer à partir des équations (11.3) que l'on peut, par exemple, écrire pour $n = 1, \ldots, N$. La première équation fait intervenir $u_0 = u_N$ et la dernière fait intervenir $u_{N+1} = u_1$, de sorte que l'on a bien un système formé d'équations dont la résolution est en principe possible. En pratique, en raison de la présence de la dérivée du potentiel, ce système non-linéaire nécessite en général une résolution numérique.

11.4 La transition commensurable-incommensurable

Lorsque les périodes a et b sont voisines mais non égales, des phases incommensurables sont possibles et la structure exacte *ne peut pas* être obtenue par une approche perturbative, car la similitude des deux périodes conduit à des phénomènes qui s'apparentent à des résonances. En raisonnant dans le domaine spatial, comme on le ferait dans le domaine temporel, on peut en effet noter que le système, possédant une période propre a, est excité par une force, de période $b \simeq a$, dérivant du potentiel de substrat. On sait qu'une telle situation de forçage près de la fréquence propre peut conduire à une réponse très grande, même lorsque l'excitation est faible. Nous allons voir que, dans ce cas, apparaissent des excitations non-linéaires localisées de type soliton, *les discommensurations.*

Avant de chercher la structure de ces discommensurations, montrons que lorsqu'on modifie progressivement le rapport a/b, il existe une valeur critique pour laquelle la structure du système change qualitativement. Pour cette valeur il se produit une transition commensurable-incommensurable dont on peut montrer l'existence en considérant deux cas limites.

Considérons le cas $a = b + \delta$, où la différence δ est très petite par rapport à b et où le rapport b/a est irrationnel.

Comme nous l'avons déjà indiqué, on doit s'attendre à une compétition entre l'énergie potentielle de substrat et l'énergie élastique de couplage. Évaluons l'énergie d'un ensemble de N_0 particules dans deux cas extrêmes :

- Si l'on suppose que le potentiel de substrat domine, alors les particules vont toutes se placer au minimum de potentiel. On aura une phase commensurable. Chacune des liaisons entre particules aura la longueur b

et contribuera donc à l'énergie totale pour $\frac{1}{2}\lambda(b-a)^2 = \frac{1}{2}\lambda\delta^2$. L'énergie potentielle de substrat sera égale, quant à elle, au minimum $V_{\rm min}$ du potentiel. Ainsi l'énergie potentielle des N_0 particules dans la phase commensurable est

$$U_{\rm com} = N_0 \left[\frac{1}{2}\lambda\delta^2 + V_{\rm min}\right] \quad . \tag{11.5}$$

- Si, au contraire, c'est le potentiel de couplage harmonique qui domine, les particules vont se placer exactement à la distance a qui est dans un rapport irrationnel avec b, pour annuler l'énergie de couplage élastique. Les particules ne seront plus au minimum du potentiel de substrat et, pour N_0 très grand, on trouvera des particules dans toutes les positions possibles par rapport au potentiel de substrat. L'énergie de cette phase parfaitement incommensurable sera donc

$$U_{\rm inc} = N_0 \langle V(x) \rangle \quad , \tag{11.6}$$

où $\langle V(x) \rangle$ est la valeur moyenne de la fonction potentiel de substrat. Pour une valeur, notée δ_c, de la différence entre a et b, la phase commensurable devient énergétiquement défavorable et une phase incommensurable se forme pour $\delta > \delta_c$. La valeur δ_c déduite de l'égalité des deux énergies est

$$\delta_c \simeq \sqrt{\frac{2\left(\langle V(x) \rangle - V_{\rm min}\right)}{\lambda}} \quad . \tag{11.7}$$

Ce résultat, obtenu par un raisonnement très simple, donne une bonne estimation de la valeur critique que l'on peut obtenir numériquement.

Il est cependant possible d'obtenir une valeur plus précise de δ_c en calculant l'énergie d'une discommensuration dans le système et en déterminant la valeur de δ pour laquelle la formation de discommensurations abaisse l'énergie totale.

11.5 Structure de la phase incommensurable

Cherchons une solution au système d'équations (11.3) en nous plaçant dans le cas d'un couplage fort, $|V| \ll \lambda b^2$, de manière à pouvoir faire l'approximation des milieux continus. On remplace la variable u_n par le champ $u(n)$. Rappelons que la dépendance temporelle est totalement ignorée puisque l'on s'intéresse à la structure *à l'équilibre.*

Définissons $\varphi(n) = u_n + n\,\delta$ qui décrit le déplacement des particules par rapport à la phase exactement commensurable puisque l'on a

$$x_n = n\,a + u_n = n(b+\delta) + u_n = n\,b + \varphi(n) \quad . \tag{11.8}$$

En tenant compte de la périodicité b du potentiel V, et donc de sa dérivée V', on obtient $V'(na+u_n) = V'\big(nb+\varphi(n)\big) = V'\big(\varphi(n)\big)$. Ceci permet de réécrire

l'équation (11.3) sous la forme

$$\varphi(n+1) + \varphi(n-1) - 2\varphi(n) = \frac{1}{\lambda} V'(\varphi(n)) \quad , \tag{11.9}$$

soit, en tenant compte de l'approximation des milieux continus,

$$\frac{\mathrm{d}^2\varphi}{\mathrm{d}n^2} = \frac{1}{\lambda} V'(\varphi) \quad . \tag{11.10}$$

En multipliant par $(\mathrm{d}\varphi/\mathrm{d}n)$ et en intégrant comme nous en avons désormais l'habitude, on obtient

$$\frac{1}{2}\lambda \left(\frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}n}\right)^2 = V(\varphi) + \mathcal{E} \quad , \tag{11.11}$$

où $\mathcal{E}$ est une constante d'intégration qu'il faut déterminer. Nous allons vérifier qu'il existe des solutions, les discommensurations que nous avons annoncées plus haut, qui sont des défauts localisés dans la phase commensurable. Pour chercher une telle solution on fait l'hypothèse que, loin de ce défaut, on a une phase parfaitement commensurable, ce qui signifie que les particules sont au fond des *minima* du potentiel V, soit $\varphi = 0$. Puisque dans cette limite on a également $(\mathrm{d}\varphi/\mathrm{d}n) = 0$ et que $V(\varphi) = V_{\min}$, la constante vaut $\mathcal{E} = -V_{\min}$. Cela permet de réécrire l'équation (11.11) sous la forme simplifiée :

$$\frac{1}{2}\lambda \left(\frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}n}\right)^2 = V(\varphi) - V_{\min} \quad . \tag{11.12}$$

Lorsque l'on considère une expression précise du potentiel, par exemple celle du modèle de FK $V(\varphi) = V_0[1 - \cos(2\pi\varphi/b)]$, on peut alors facilement obtenir la solution de l'équation (11.12) par séparation des variables comme nous l'avons montré dans le chapitre sur l'équation de sine-Gordon (cf. équation (2.20)). Pour le potentiel sinusoïdal, avec les paramètres du modèle FK de la phase incommensurable, le même calcul que celui qui conduit à la solution soliton du modèle SG donne ici

$$\varphi(n) = \frac{2b}{\pi} \arctan \left\{ \exp \left[2\pi \sqrt{\frac{V_0}{\lambda b^2}} (n - n_0) \right] \right\} \quad , \tag{11.13}$$

qui est représenté sur la figure 11.2.

Comme le montre cette figure, comme φ est nul pour $n \ll n_0$, on a simplement $x_n = nb$, soit une phase commensurable, jusqu'à ce que l'on rencontre la discommensuration. Au niveau de celle-ci, l'énergie élastique accumulée dans tous les termes de couplage harmonique, comprimés à la longueur b au lieu de leur longueur d'équilibre a, est brutalement relâchée par un accroissement rapide de x_n dans une petite région. Puis le système reprend une structure commensurable, et recommence donc à accumuler de l'énergie de compression.

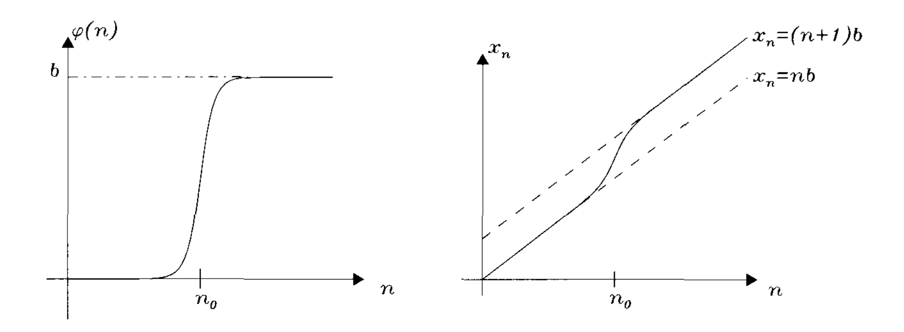


FIG. 11.2 – a) Évolution de $\varphi(n)$ au voisinage d'une discommensuration. b) Position des atomes en présence de cette discommensuration. Les lignes en tirets correspondent aux phases commensurables $x_n = nb$ et $x_n = (n+1)b$.

11.6 Calcul de δ_c

Pour déterminer la valeur critique de δ pour laquelle apparaît la première discommensuration, il n'est pas nécessaire de résoudre pour la variable $\varphi(n)$. On peut obtenir l'énergie d'une discommensuration par le calcul de l'énergie potentielle du système

$$U = \sum_n \frac{\lambda}{2}(u_{n+1} - u_n)^2 + V(na + u_n) \quad . \tag{11.14}$$

Dans l'approximation des milieux continus, on obtient :

$$U = \int \mathrm{d}n \left[\frac{\lambda}{2} \left(\frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}n} - \delta \right)^2 + V(\varphi) \right] \quad , \tag{11.15}$$

puisque $u_n = -n\delta + \varphi(n)$. Comme $\varphi(n)$ est identiquement nul dans le cas de la phase commensurable, on peut exprimer l'énergie potentielle d'une phase commensurable U_{com}, sous la forme

$$U_{\text{com}} = \int \mathrm{d}n \left[\frac{\lambda}{2}\delta^2 + V_{\min} \right] \quad , \tag{11.16}$$

qui sera proportionnelle à la longueur du système puisque l'intégrant est constant. L'énergie d'une discommensuration est la différence entre l'énergie U du système en présence d'une discommensuration et l'énergie U_{com} de la phase parfaitement commensurable

$$E_{\text{disc}}(\delta) = U - U_{\text{com}} \tag{11.17}$$

$$= \int \mathrm{d}n \left[\frac{\lambda}{2} \left(\left(\frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}n} \right)^2 - 2\delta \frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}n} \right) + V(\varphi) - V_{\min} \right] \quad . \tag{11.18}$$

Elle se réécrit en utilisant l'expression (11.12) sous la forme simplifiée suivante :

$$E_{\text{disc}}(\delta) = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}n \; 2\big[V(\varphi) - V_{\min}\big] - \lambda\delta \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}n \frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}n} \quad . \tag{11.19}$$

La première intégrale, que nous noterons $E_{\text{disc}}(0)$, ne dépend pas de δ. Elle peut être calculée sans connaître l'expression de la solution $\varphi(n)$ correspondant à une discommensuration, comme nous avions procédé au chapitre 2 pour calculer l'énergie d'un soliton du modèle sine-Gordon. On obtient ainsi :

$$E_{\text{disc}}(0) = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}n \; 2\big[V(\varphi) - V_{\min}\big] \tag{11.20}$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}n \; \sqrt{2\lambda\,(V(\varphi) - V_{\min})} \; \underbrace{\sqrt{\frac{2}{\lambda}\,(V(\varphi) - V_{\min})}}_{=\mathrm{d}\varphi/\mathrm{d}n} \tag{11.21}$$

$$= \int_{\varphi=0}^{\varphi=b} \sqrt{2\lambda\,(V(\varphi) - V_{\min})} \; \mathrm{d}\varphi \quad . \tag{11.22}$$

Son expression ne dépend que de la forme choisie pour le potentiel de substrat. Dans le cas particulier d'un potentiel sinusoïdal $V(\varphi) = V_0\,[1 - \cos(2\pi\varphi/b)]$, on obtient :

$$E_{\text{disc}}(0) = \frac{4b}{\pi}\sqrt{\lambda V_0} \quad . \tag{11.23}$$

Pour une discommensuration, la seconde intégrale de l'équation (11.19) est égale à $\varphi(+\infty) - \varphi(-\infty) = b$, ce qui donne donc pour l'énergie d'une discommensuration :

$$E_{\text{disc}}(\delta) = E_{\text{disc}}(0) - \lambda\,\delta\,b \quad . \tag{11.24}$$

Le premier terme est l'énergie d'une discommensuration dans le cas particulier où $\delta = 0$, c'est-à-dire $a = b$. Ce cas particulier est celui que nous avions considéré dans le chapitre 2 sur les solitons topologiques et dans le modèle de FK des dislocations présenté au chapitre 9. Pour le potentiel sinusoïdal, $E_{\text{disc}}(0)$ correspond donc à l'énergie d'un soliton sine-Gordon.

Mais la formule (11.24) montre que, pour $\delta \neq 0$, l'énergie de la discommensuration comporte une seconde contribution qui tend à *réduire* sa valeur par rapport à celle d'un soliton. On constate que, lorsque le désaccord entre la longueur d'équilibre des liaisons et la période du potentiel, $\delta = a - b$, est suffisamment grand, le terme de droite devient supérieur à l'énergie $E_{\text{disc}}(0)$: *le système peut donc abaisser son énergie en créant des discommensurations.* Physiquement, cet effet provient du fait que la création d'une discommensuration relâche l'énergie élastique accumulée dans les interactions entre particules

qui, dans la phase commensurable, sont comprimées en-dessous de leur valeur d'équilibre.

La valeur δ_c pour laquelle l'énergie d'une discommensuration s'annule est la valeur critique au-delà de laquelle la phase commensurable n'est plus la phase énergétiquement la plus favorable. C'est la valeur qui correspond à la *transition commensurable–incommensurable* et elle vaut

$$\delta_c = \frac{E_{\text{disc}}(0)}{\lambda b} = \frac{4b\sqrt{\lambda V_0}}{\pi \lambda b} = \frac{4}{\pi}\sqrt{\frac{V_0}{\lambda}} \quad , \qquad (11.25)$$

alors que la formule (11.7), obtenue par une méthode très approximative, conduisait à l'expression très proche $\delta_c = 2\sqrt{V_0/\lambda}$.

Pour $\delta > \delta_c$, puisque la formule (11.24) montre que l'énergie d'une discommensuration est négative, on pourrait penser que le système va tendre naturellement à créer une infinité de dislocations pour abaisser son énergie autant que possible. En fait, il n'en est rien, car il faut aussi tenir compte de l'énergie d'interaction entre les discommensurations. Plus leur nombre augmente, plus cette énergie croît, et la structure de la phase incommensurable sera déterminée par un équilibre entre le gain d'énergie par création de discommensurations et la dépense par augmentation de l'énergie d'interaction entre ces discommensurations. La phase est ainsi constituée d'un réseau de discommensurations dont la distance d'équilibre permet à x_n d'évoluer avec n en moyenne comme $x = n\,a$ tout en étant le plus souvent dans une phase commensurable, sauf au niveau des défauts localisés que constituent les discommensurations (cf. fig. 11.3). Cette solution réalise ainsi un compromis entre le couplage qui tend à imposer la solution $x = n\,a$ et le potentiel de substrat qui tend à sélectionner une phase commensurable. Dans ce cas l'évolution de $\varphi(n)$ se fait selon une solution multisolitons de l'équation non-linéaire (11.10).

11.7 Diagramme de phases

Comme le modèle a mis en évidence le rôle de deux paramètres fondamentaux :

- le rapport a/b (ou la valeur de δ) qui détermine le taux de frustration du système et
- le rapport de l'amplitude du potentiel de substrat par rapport à la constante de couplage λ,

on peut chercher à déterminer son diagramme de phases, c'est-à-dire déterminer dans quelles régions de l'espace des paramètres le système est dans une phase commensurable et dans quelles régions il est dans une phase incommensurable.

Nous connaissons déjà ce diagramme au voisinage de $a/b = 1$, puisque l'expression (11.25) détermine la valeur maximale de δ_c pour que la phase reste commensurable. Nous avions raisonné en faisant implicitement l'hypothèse

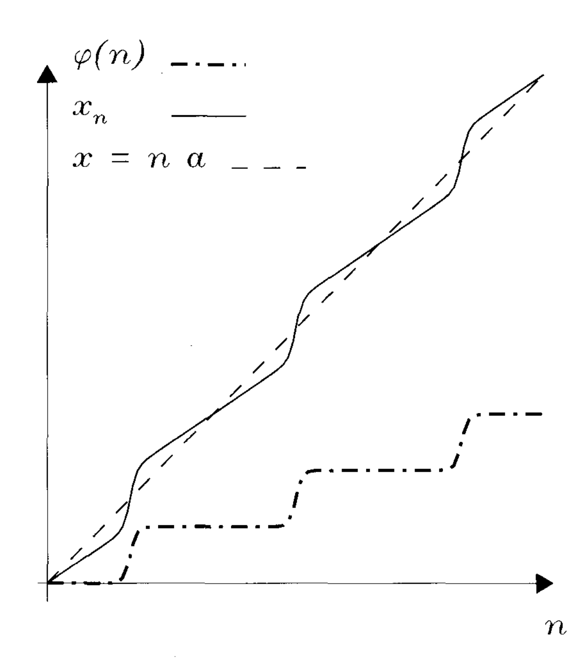


FIG. 11.3 – Variation de $\varphi(n)$ et x_n pour une phase incommensurable constituée d'un réseau de dislocations. La droite en tirets correspond à l'équation $x = n\,a$.

$a > b$ ($\delta > 0$) pour faciliter la discussion, mais tous les résultats restent valables pour $a < b$ ($\delta < 0$). Dans ce cas, la discommensuration tend à rapprocher localement les atomes. Il s'agit d'un antisoliton. Si l'on choisit de représenter le diagramme de phases en portant en abscisse le rapport a/b et en ordonnée $\sqrt{V_0/\lambda}$, l'équation (11.25) montre que les limites du domaine de la phase commensurable sont des droites. La phase commensurable est ainsi située dans un « cône de commensurabilité » centré sur la ligne $a/b = 1$.

Mais il est tout à fait possible de faire des raisonnements analogues autour des valeurs rationnelles $a/b = M/N$ où M et N sont des entiers, puisque nous avons déjà établi l'existence de phases commensurables dans ces cas-là. Pour ces rapports rationnels il existe aussi une frustration δ_c (dépendant de M/N) au-delà de laquelle la phase commensurable est remplacée par une phase incommensurable. On trouve que la déstabilisation de la phase commensurable se produit encore par formation de discommensurations dont la structure est plus complexe que celle des discommensurations que nous avons étudiées car la phase commensurable, à partir de laquelle elles se forment, est elle-même plus complexe. Pour de faibles valeurs de $\sqrt{V_0/\lambda}$ pour lesquelles l'approximation des milieux continus est valable la variation de δ_c est encore linéaire en $\sqrt{V_0/\lambda}$ de sorte que l'on doit compléter le diagramme par d'autres « cônes de commensurabilité », comme le montre la figure 11.4. Hors de ces cônes, les phases sont incommensurables.

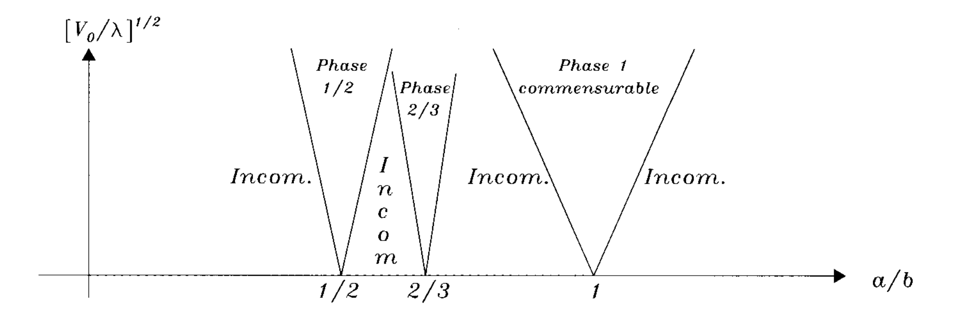


FIG. 11.4 – Représentation dans le diagramme $(\sqrt{V_0/\lambda}, a/b)$ des cônes de commensurabilité autour de quelques valeurs rationnelles. Ce diagramme se limite à la région des couplages forts.

Cependant, la figure montre clairement que ce raisonnement est incomplet pour deux raisons. D'une part, on doit en principe envisager des cônes de commensurabilité autour de tous les rationnels, c'est-à-dire « presque partout » sur la figure et, d'autre part, les limites des cônes, telles que nous les avons décrites, se rencontrent, et dans certains domaines nous ne pouvons plus préciser la nature de la phase.

En fait, pour de grandes valeurs de M et N, les cônes de commensurabilité deviennent extrêmement étroits mais, surtout, le diagramme que représente la figure 11.4 n'est valable que pour de très petites valeurs du paramètre $\sqrt{V_0/\lambda}$. Lorsque la valeur du potentiel V_0 augmente, il faut abandonner l'hypothèse de couplage fort. Les droites définissant les cônes se déforment, traduisant le rôle joué par les effets de discrétisation. Le diagramme de phases complet, nécessitant une résolution numérique, a été déterminé par S. Aubry [20] et a l'allure représentée sur la figure 11.5. Les zones dans lesquelles aucun rapport n'est indiqué correspondent à des phases incommensurables elles-mêmes entrecoupées de faibles domaines de commensurabilité d'ordre élevé (du type 3/7, 4/9, etc.). Il faut noter qu'au fur et à mesure que la valeur de V_0 augmente, le diagramme se simplifie et seules les phases de commensurabilité simple subsistent. C'est pourquoi ce sont ces phases qui sont détectées dans les études expérimentales.

11.8 Dynamique de la phase incommensurable

Jusqu'à présent, nous avons étudié les structures à l'équilibre, mais il est bien sûr intéressant de décrire la dynamique de ces phases commensurables et incommensurables. Pour cela il faut considérer l'hamiltonien du système en ajoutant une contribution d'énergie cinétique à l'expression (11.1) de l'énergie potentielle du modèle. Il en résulte des équations de mouvement qui

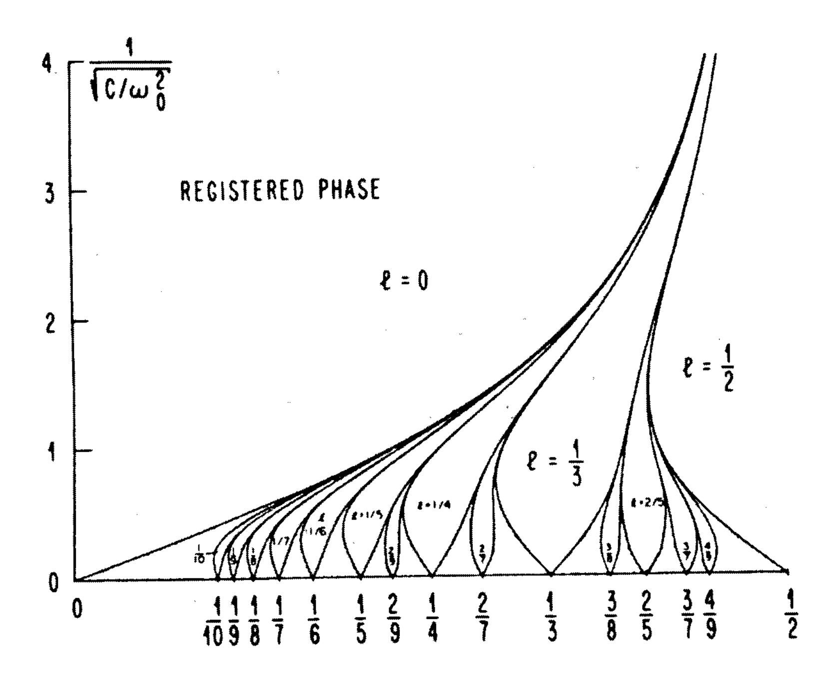


FIG. 11.5 – Diagramme des phases complet présentant les différents cônes de commensurabilité dans le plan $\left(\sqrt{V_0/\lambda}, a/b\right)$ (d'après la référence [20]).

constituent la contrepartie dynamique des équations (11.9),

$$m\ddot{\varphi}_n - \lambda\big[\varphi(n+1) + \varphi(n-1) - 2\varphi(n)\big] + V'\big(\varphi(n)\big) = 0 \quad , \tag{11.26}$$

où m est la masse des atomes.

Dans l'approximation des milieux continus, la situation est assez simple :

- toute phase commensurable est accrochée au réseau, puisque les atomes sont dans les *minima* de potentiel, ce qui signifie qu'elle peut vibrer autour de sa structure d'équilibre, mais sans translation d'ensemble ;
- au contraire, toute phase incommensurable peut glisser librement par rapport au substrat, puisqu'elle est formée de solitons mobiles lorsque l'hypothèse du couplage fort est valable. L'origine physique de cette propriété est analogue à celle rencontrée pour les dislocations : dans la phase incommensurable il existe des particules à tous les niveaux du potentiel de substrat, y compris sur les maxima. Si le déplacement de certaines particules nécessite un apport d'énergie potentielle de substrat, le déplacement des autres en fournit.

Pour étudier la dynamique de la phase incommensurable, on cherche une solution de l'approximation continue des équations (11.26) sous la forme

$$\varphi(n,t) = \varphi_0(n) + \Delta\varphi(n,t) \quad , \tag{11.27}$$

où $\varphi_0(n)$ est la solution multisolitons qui correspond à la phase incommensurable dont on veut étudier la dynamique. En suivant la démarche désormais habituelle, on linéarise en ne gardant que les termes du premier ordre en $\Delta\varphi$ dans le développement de l'équation du mouvement. On trouve alors qu'il existe un mode de vibration de la phase incommensurable dont la relation de dispersion $\omega(k)$ passe par l'origine. La solution à $k = 0$, pour laquelle $\omega = 0$, est le mode de Goldstone de la solution multisolitons. Elle est associée au glissement en bloc de la phase incommensurable par rapport au substrat. Ce mode est appelé *mode de phason.* On peut obtenir sa courbe de dispersion pour $k \neq 0$ en utilisant une approche de coordonnées collectives : chaque discommensuration formant la solution multisolitons est traitée comme une quasi-particule qui, dans l'approximation des milieux continus, est totalement libre de se déplacer par rapport au substrat, mais interagit avec les quasi-particules voisines.

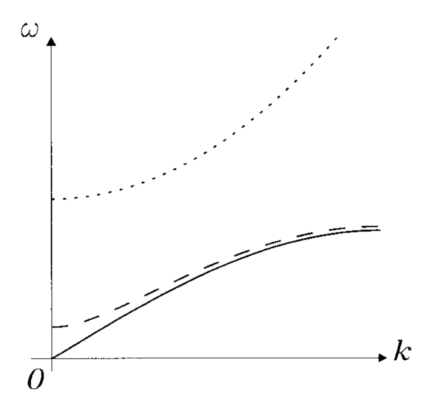


FIG. 11.6 Représentation schématique de la relation de dispersion des phases commensurables et incommensurables. Le trait plein passant par l'origine est le mode de phason. La ligne pointillée est la relation de dispersion d'une phase commensurable. La ligne en tirets correspond à l'évolution du mode de phason quand on tient compte des effets de discrétisation.

Le mode de phason n'est cependant jamais observé car il est affecté par les effets de réseau. Serge Aubry [20] a démontré l'existence de ce que l'on appelle désormais la « Transition d'Aubry » ou « Transition par brisure d'analyticité » : pour des valeurs du potentiel V_0 inférieures à une valeur critique V_{0c} le phason existe, alors que pour des valeurs supérieures, la phase incommensurable est accrochée au réseau. Au lieu de s'annuler, la fréquence des modes de petit déplacement de cette phase tend vers une valeur non nulle quand k s'annule, appelée fréquence de Peierls-Nabarro (PN), car l'ancrage de la phase incommensurable est analogue au piégeage d'une dislocation par les effets de réseau.

La phase incommensurable ancrée a des propriétés tout à fait remarquables comme, par exemple, sa réponse à une force de traction. Quand on augmente régulièrement la force, l'allongement se fait par sauts selon une courbe en « escalier du diable », c'est-à-dire possédant une infinité de marches de tailles différentes. Bien entendu, seules quelques-unes ont pu être mises en évidence par des études structurales aux rayons X en étudiant le comportement d'un matériau à phase incommensurable sous pression. Ce comportement étonnant provient du fait que, dans la solution multisoliton piégée par le potentiel de PN, tous les solitons ne sont pas dans la même position par rapport à ce potentiel de discrétisation. Quand on augmente la force de traction sur la phase incommensurable, certains sont décrochés les premiers, puis d'autres suivent ensuite, et il y a toute une hiérarchie de transitions locales de décrochage qui génèrent l'« escalier du diable ».

11.9 Formation des discommensurations

Effet de bord dans le cas d'un système fini

Considérons maintenant un système de longueur L avec des extrémités libres, en nous limitant à nouveau au cas $a = b + \delta$ et en admettant que l'approximation des milieux continus est justifiée. Nous allons à nouveau chercher la limite de stabilité d'une phase commensurable, mais cette fois-ci en tenant compte des effets de bords qui avaient été négligés dans les études précédentes où nous considérions le système comme infini.

Outre l'équation (11.10), la minimisation de l'énergie potentielle U nécessite de tenir compte des conditions aux limites. Considérons par exemple le cas de la première particule du réseau, numérotée 0. Elle n'est liée qu'à une seule particule voisine, la particule 1. Dans l'approximation du couplage fort où les positions des particules sont essentiellement déterminées par les termes de couplage, le dernier « ressort » liant les particules minimise son énergie en adoptant une longueur égale à sa longueur d'équilibre a, ce qu'il peut faire puisqu'il a une extrémité libre (cf. fig. 11.1 en considérant que la chaîne atomique est interrompue à gauche). On a donc :

$$x_1 - x_0 = a = b + \delta \tag{11.28}$$

$$= b + \varphi(1) - \varphi(0) \qquad i.e. \qquad \varphi(1) - \varphi(0) = \delta \quad . \tag{11.29}$$

Dans la limite des milieux continus, les conditions d'extrémités libres en 0 et L donnent donc :

$$\left(\frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}n}\right)_{x=0} = \left(\frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}n}\right)_{x=L} = \delta \quad . \tag{11.30}$$

L'équation (11.12) est toujours valable puisque l'on s'intéresse à la stabilité d'une phase qui est commensurable au cœur du matériau. En la combinant avec l'équation (11.30) dans le cas particulier des extrémités $n = 0$ ou $n = L$,

on aboutit à :

$$\frac{\lambda}{2}\,\delta^2 = V(\varphi_{\text{ext}}) - V_{\min} \quad . \tag{11.31}$$

La valeur φ_{ext} va donc s'ajuster pour satisfaire cette condition qui fixe la position des particules situées aux extrémités du réseau. Cela ne sera cependant possible que si δ est inférieur à la valeur limite δ_{cL} définie par

$$\frac{\lambda}{2}\,\delta_{cL}^2 = V_{\max} - V_{\min} \quad . \tag{11.32}$$

Par comparaison avec l'expression (11.7), on réalise immédiatement que

$$\delta_{cL} > \delta_c \quad . \tag{11.33}$$

Ainsi, dans un milieu fini, si on augmente progressivement le désaccord δ entre la longueur des ressorts au repos et la période du potentiel, la phase incommensurable deviendra instable au cœur du réseau, alors que les particules aux extrémités sont encore dans des états stables. Cependant, les discommensurations ne peuvent pas apparaître au cœur du matériau, même lorsque leur énergie, une fois qu'elles sont formées, est négative (c'est-à-dire pour $\delta > \delta_c$). En effet, pour leur formation au cœur d'un matériau, il faudrait faire passer un grand nombre d'atomes au-dessus de la barrière de potentiel de substrat (une infinité d'atomes dans le cas d'un système infini). Pour s'en convaincre, il suffit de regarder la figure 11.2 : pour former la discommensuration, il faut déplacer de b tous les atomes situés à droite de la discommensuration. Les discommensurations ne peuvent apparaître par conséquent que par les bords du matériau : dans tout le domaine de valeurs $\delta_c < \delta < \delta_{cL}$, la phase commensurable est donc *métastable.* L'étude du système fini est en définitive fondamentale quand on veut déterminer le domaine réel d'existence de la phase commensurable.

Action d'une force extérieure

Considérons maintenant le système fini du paragraphe précédent dans le cas où une force extérieure F est appliquée à tous les atomes (il pourrait, par exemple, s'agir de l'effet d'un champ électrique pour une phase réalisée avec des ions, ou d'un effort de cisaillement). En présence de cette force on doit remplacer le potentiel de substrat $V(\varphi)$ par le potentiel effectif $\widetilde{V}(\varphi) = V(\varphi) - F\varphi$, représenté sur la figure 11.7. L'existence d'une phase commensurable n'est possible bien sûr que si $\widetilde{V}(\varphi)$ possède des *minima*, c'est-à-dire puisque $\widetilde{V}'(\varphi) = V'(\varphi) - F$, que si la condition

$$F < F_{\max} = \max[V'(\varphi)] \tag{11.34}$$

est vérifiée.

La modification du potentiel entraîne un changement de la valeur critique de δ pour laquelle les extrémités deviennent instables. Supposons à nouveau

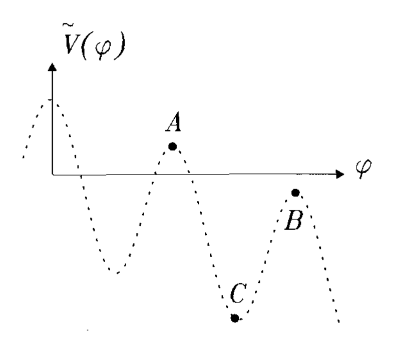


FIG. 11.7 – Représentation du potentiel effectif $\widetilde{V}(\varphi)$ sous l'action d'une force extérieure F.

que l'on ait une phase commensurable dans le cœur du matériau et cherchons la condition que doit vérifier φ aux extrémités du réseau. Les équations (11.10) et (11.11), qui résultent de la minimisation de l'énergie potentielle du système, restent valables à condition de les exprimer avec le potentiel $\widetilde{V}$. On a ainsi :

$$\frac{1}{2}\lambda\left(\frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}n}\right)^2 = \widetilde{V}(\varphi) + \mathcal{E} \quad . \tag{11.35}$$

Pour déterminer la constante $\mathcal{E}$, on utilise le fait qu'au cœur du matériau on a une phase commensurable : les particules sont donc placées dans des *minima* de potentiel et distantes de b, ce qui correspond à $\mathrm{d}\varphi/\mathrm{d}n = 0$. L'équation (11.35) appliquée au cœur du matériau donne donc :

$$\mathcal{E} = -\widetilde{V}_{\mathrm{min}}(\varphi) \quad . \tag{11.36}$$

En appliquant maintenant l'équation (11.35) au niveau des extrémités du réseau on obtient :

$$\frac{1}{2}\lambda\left(\frac{\mathrm{d}\varphi_{\mathrm{ext}}}{\mathrm{d}n}\right)^2 = \widetilde{V}(\varphi_{\mathrm{ext}}) - \widetilde{V}_{\mathrm{min}} \quad . \tag{11.37}$$

Le raisonnement que nous avons fait au paragraphe précédent, pour déterminer la condition qu'impose l'extrémité libre, reste valable et l'on a donc encore $\mathrm{d}\varphi_{\mathrm{ext}}/\mathrm{d}n = \delta$, ce qui conduit, comme précédemment à une équation que doit vérifier φ_{ext}

$$\frac{1}{2}\lambda\delta^2 = \widetilde{V}(\varphi_{\mathrm{ext}}) - \widetilde{V}_{\mathrm{min}} \quad . \tag{11.38}$$

Pour exploiter cette condition de façon à en déduire la valeur limite de δ pour laquelle l'extrémité est stable, il faut prendre quelques précautions en raison de la forme du potentiel $\widetilde{V}$. Supposons pour fixer les idées que le minimum de $\widetilde{V}$ correspondant à la phase incommensurable au cœur du matériau soit le point C de la figure 11.7. La plus grande valeur possible pour

δ compatible avec la condition (11.38) est obtenue lorsque $\widetilde{V}(\varphi_{\mathrm{ext}})$ correspond à un maximum du potentiel adjacent au minimum C. Il peut s'agir *a priori* soit du point A soit du point B sur la figure 11.7, selon que φ_{ext} est plus grand ou plus petit que φ dans le cœur du matériau. La situation à prendre en compte dépend du signe de δ qui détermine si les discommensurations sont des solitons ou des antisolitons, mais aussi de l'extrémité considérée car, pour créer une discommensuration d'un type donné, les déplacements que l'on doit imposer aux atomes terminaux sont de signes opposés aux deux extrémités du réseau. Il en résulte que quel que soit le signe de δ, il y aura toujours une extrémité pour laquelle le maximum qui détermine la stabilité correspondra au point B de la figure 11.7, c'est-à-dire à celui des deux maxima adjacents à C pour lequel la valeur de $\widetilde{V}$ est la plus proche de $\widetilde{V}(C)$.

La limite de stabilité de l'une des deux extrémités du réseau est donc atteinte quand δ prend la valeur limite

$$\frac{\lambda}{2}\delta_{cL}^2 = \widetilde{V}_{\max}(B) - \widetilde{V}_{\min}(C) \quad . \tag{11.39}$$

Comme la différence $\widetilde{V}_{\max}(B) - \widetilde{V}_{\min}(C)$ se réduit quand la force augmente, la valeur de δ_{cL} décroît avec F. Il en résulte que, pour une valeur donnée de δ, il existe une force critique $F_c(\delta)$ au-dessus de laquelle une des extrémités du réseau devient instable. Pour $F > F_c(\delta)$, une discommensuration se forme à cette extrémité et se propage vers l'intérieur du matériau. Lorsque qu'elle a pénétré assez loin à l'intérieur, on retrouve à nouveau vers l'extrémité une phase commensurable analogue à celle qui existait avant la création de la discommensuration, et le processus va donc se renouveler jusqu'à ce que la densité de discommensurations dans le matériau ait atteint la valeur que prévoit l'étude dans le cœur pour le paramètre δ considéré.

Le bord apparaît ainsi comme une source de solitons, dont le taux de création dépend de l'écart entre la force extérieure appliquée F et la valeur critique F_c. C'est un mécanisme qui intervient, par exemple, dans la diffusion des atomes appartenant à des couches adsorbées.

11.10 Conclusion

Nous n'avons présenté qu'une vue très partielle des phases incommensurables qu'il faudrait développer dans différentes directions. L'étude de modèles de dimensions supérieures à 1 est ainsi essentielle pour décrire de manière plus fidèle les surfaces. Cela conduit à de nouvelles questions : Comment les discommensurations sont-elles orientées ? Peuvent-elles se croiser ? Quel est l'effet de leurs vibrations thermiques ? Certaines de ces questions ont trouvé une réponse qui est présentée dans un article de revue de Jacques Villain [152].

Il existe également une liaison très intéressante avec les systèmes dynamiques et le chaos. L'équation (11.9) donnant la structure du système peut

être réécrite sous la forme d'une application [21]

$$p_{n+1} = p_n + \frac{1}{\lambda} V'(\varphi_n) \tag{11.40}$$

$$\varphi_{n+1} = p_n + \varphi_n + \frac{1}{\lambda} V'(\varphi_n) \quad \text{(modulo } b) \tag{11.41}$$

en posant $p_n = \varphi_n - \varphi_{n-1}$. C'est une application non-linéaire en raison de la présence de la dérivée du potentiel. Les trajectoires dans l'espace des phases $\{p, \varphi\}$ représentent diverses situations physiques :

- Les cycles discrets dans lesquels on parcourt un nombre fini de points avant de revenir au point de départ correspondent à des phases commensurables. La période de la phase, en unités du pas de réseau b, est donnée par le nombre de points formant le cycle.
- Les phases incommensurables, en revanche, sont associées à des ensembles de points, situés sur une ligne continue, pour lesquels l'application ne revient jamais exactement sur un point qu'elle a déjà visité auparavant.
- Il existe également des régions chaotiques qui correspondent à des *phases désordonnées.*

Si l'on reprend l'exemple simple du potentiel sinusoïdal

$$V(\varphi) = V_0 \left[1 - \cos(2\pi\varphi/b)\right] \quad , \tag{11.42}$$

on obtient ainsi l'*application standard* :

$$p_{n+1} = p_n + \frac{2\pi V_0}{\lambda b} \sin\left(\frac{2\pi\varphi_n}{b}\right) \tag{11.43}$$

$$\varphi_{n+1} = p_n + \varphi_n + \frac{2\pi V_0}{\lambda b} \sin\left(\frac{2\pi\varphi_n}{b}\right) \quad \text{(modulo } b) \quad , \tag{11.44}$$

qui devient chaotique pour $V_0/(\lambda b^2) > \alpha_c \simeq 0.8$. En-dessous de cette valeur critique, l'application génère des trajectoires sur un tore, qui correspondent à l'état fondamental ; ce domaine est celui où il existe un mode de phason. Pour des valeurs supérieures, au contraire, les trajectoires sont situées sur un ensemble de Cantor ; les effets de discrétisation dominent et la phase incommensurable est accrochée au réseau.

Les méthodes d'étude des systèmes dynamiques ont non seulement permis de retrouver certains résultats que nous avons présentés en termes de solitons, mais continuent à donner lieu à des recherches, notamment pour décrire des matériaux amorphes comme les verres.

Chapitre 12

Solitons dans les systèmes magnétiques

Les systèmes magnétiques ont été l'objet de très nombreuses études pour deux raisons :

- ce sont tout d'abord d'excellents systèmes modèles pour l'étude des transitions de phase, sur lesquels il a été possible de mener à bien des études très complètes, tant théoriques qu'expérimentales ;
- et, par ailleurs, leurs applications, tout particulièrement le développement de supports magnétiques pour l'enregistrement à haute densité, ont nécessité le développement de matériaux performants.

Les matériaux réels sont bien sûr tridimensionnels, bien que l'on développe des films quasi-bidimensionnels pour l'enregistrement magnétique, mais comme nous le verrons, il existe également des solides dans lesquels les interactions magnétiques sont quasiment unidimensionnelles. Les matériaux magnétiques constituent l'un des meilleurs exemples où la théorie des solitons à l'échelle atomique peut être vérifiée expérimentalement de manière très précise [107].

12.1 Ferromagnétisme et antiferromagnétisme

Dans un solide, le moment magnétique des atomes a deux origines :

- le spin des électrons et des noyaux, d'origine quantique, qui est un moment cinétique intrinsèque des particules auquel est associé un moment magnétique ;
- le moment cinétique orbital des électrons, dû à leur mouvement autour du noyau, qui est quantifié et auquel correspond également un moment magnétique.

Le moment magnétique total $\overrightarrow{M}$ est lié au moment cinétique total $\overrightarrow{J}$ par la relation $\overrightarrow{M} = \gamma \overrightarrow{J}$ où γ est le rapport gyromagnétique. Pour les systèmes

que nous allons considérer, le moment magnétique qui intervient provient du spin des électrons non-appariés. Il s'écrit $\overrightarrow{M} = \gamma \overrightarrow{S}$, $\overrightarrow{S}$ étant le spin total de l'atome.

La compréhension de l'origine des interactions entre les moments magnétiques dans les solides est l'un des domaines les plus difficiles de la physique des solides, et elle est encore loin d'être complète [17, 94]. Il existe cependant des résultats généraux bien établis. Le terme prépondérant de l'interaction n'est pas le terme de couplage dipolaire entre les moments magnétiques, comme on pourrait le croire. Il y a un terme beaucoup plus important qui provient de l'énergie d'interaction *électrostatique* entre les électrons, et est lié aux effets purement quantiques d'indiscernabilité des particules. L'énergie d'interaction d'échange qui en résulte s'écrit en fonction des deux spins $\overrightarrow{S}_1$ et $\overrightarrow{S}_2$ qui interagissent sous la forme

$$U = -\mathcal{J} \; \overrightarrow{S}_1 . \overrightarrow{S}_2 \quad , \tag{12.1}$$

appelée hamiltonien d'échange d'Heisenberg. La constante $\mathcal{J}$, appelée *intégrale d'échange*, est très difficile à calculer quantitativement dans un solide. Elle est liée au chevauchement des distributions de charges des atomes, et dépend donc fortement de leur distance. L'intégrale d'échange décroît exponentiellement avec la distance ce qui implique que :

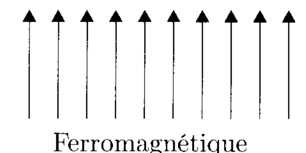
- les interactions entre plus proches voisins sont prépondérantes ;
- l'interaction est quasi-unidimensionnelle dans le cas d'un solide anisotrope pour lequel les distances entre atomes magnétiques sont nettement plus faibles dans une direction que dans les autres. Un excellent exemple est le TMMC[1], ($(CH_3)_4N^+ \; MnCl_3^-$), pour lequel les distances entre les ions Mn^{2+} qui portent les moments magnétiques sont de 3, 25 Å longitudinalement et de 9, 15 Å transversalement, conduisant à un rapport entre les intégrales d'échange transversale et longitudinale de l'ordre de 10^{-5}. Dans le cas de TMMC, on peut vraiment parler de « chaînes de spins ». Un autre exemple très étudié est $CsNiF_3$ dont le rapport entre les intégrales d'échange est proche de 10^{-3}.

Dans les systèmes magnétiques on rencontre :

- un effet *coopératif* puisque les spins voisins possèdent une énergie d'interaction non nulle ;
- un effet *non-linéaire* car l'interaction en $\overrightarrow{S}_1 . \overrightarrow{S}_2$ fait intervenir le cosinus de l'angle $\theta = (\overrightarrow{S}_1, \overrightarrow{S}_2)$.

On peut donc s'attendre à avoir des excitations non-linéaires telles que des solitons. C'est en effet ce que confirme l'analyse théorique que nous allons présenter dans ce chapitre, qui a été très bien vérifiée par de nombreuses expériences.

1. Tetramethylammonium manganese tetrachlorure (TMMC).



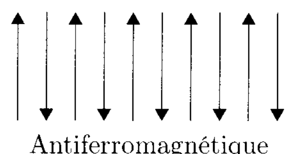


FIG. 12.1 – Représentation schématique d'un matériau ferromagnétique (a) et antiferromagnétique (b). Chaque flèche représente le moment magnétique associé à chaque élément du matériau.

Le type d'ordre magnétique d'un matériau dépend du signe de l'intégrale d'échange $\mathcal{J}$:

- lorsque $\mathcal{J} > 0$, l'énergie d'interaction U la plus faible est obtenue lorsque deux spins $\vec{S}_1$ et $\vec{S}_2$ sont de même sens. Le système a donc tendance à prendre un ordre ferromagnétique où tous les moments magnétiques sont parallèles et de même sens (tout au moins à température assez basse pour que les fluctuations thermiques ne détruisent pas cet ordre). Leur somme est non nulle et le matériau a un moment magnétique permanent dû à la superposition des moments individuels (fig. 12.1(a)). C'est le cas de $CsNiF_3$ dont les chaînes de Ni^{2+} sont les prototypes de chaînes de spins ferromagnétiques ;
- lorsqu'au contraire $\mathcal{J} < 0$, l'énergie d'interaction U est minimale lorsque deux spins voisins sont antiparallèles (fig. 12.1(b)). Le système possède un ordre antiferromagnétique et son moment magnétique total est nul. C'est le cas du TMMC, car l'interaction n'est pas directe mais se fait à travers les couches électroniques du chlore.

12.2 Équations décrivant la dynamique d'une chaîne de spins

Considérons, dans un premier temps, une chaîne de spins en interaction ferromagnétique ($\mathcal{J} > 0$), formant un réseau unidimensionnel dans la direction z, placée dans un champ magnétique dirigé dans la direction orthogonale x, dont l'hamiltonien est

$$H = -\mathcal{J} \sum_n \vec{S}_n . \vec{S}_{n+1} + \sum_n A \, (S_n^z)^2 - \gamma B_x \sum_n S_n^x \quad . \tag{12.2}$$

Outre le premier terme d'interaction que nous avons déjà discuté, on distingue deux contributions supplémentaires :

- un terme d'anisotropie contrôlé par le paramètre $A > 0$ tel que toute croissance de le composante z des spins sera coûteuse en énergie ; le plan xy est donc un plan favorable pour le mouvement des spins. C'est une situation fréquente dans les systèmes magnétiques unidimensionnels ;

– un terme dû au champ magnétique extérieur $\overrightarrow{B}$ qui a tendance à aligner les spins selon la direction x ($\gamma > 0$).

Compte tenu des différentes contributions, l'état fondamental de la chaîne est celui où tous les spins sont alignés selon x. On obtient donc un état ferromagnétique, comme représenté sur la figure 12.1(a). Ce système rappelle la chaîne de pendules étudiée dans le chapitre 2, avec la différence importante que le couplage n'est pas harmonique. L'analogie permet néanmoins de prévoir qualitativement, deux types d'excitations :

– des excitations de faible amplitude, correspondant aux oscillations des spins autour de leur position d'équilibre. Ce sont des ondes de spins aussi appelées *magnons*;
– des excitations de type topologique provenant de la dégénérescence de l'état fondamental, puisqu'une rotation des spins de 2π autour de l'axe z ne change pas l'énergie du système. Ces excitations seront des rotations de 2π des spins constituant un lien continu entre deux réalisations de l'état de base dans deux régions de la chaîne.

Bien que cette analogie soit qualitativement correcte, nous allons cependant découvrir que la chaîne de spins est d'une complexité supérieure à la chaîne de pendules car elle possède des excitations intermédiaires entre solitons topologiques et non topologiques. Pour établir ce résultat, nous devons écrire les équations du mouvement des spins qui sont des quantités d'origine purement quantique. Il faut donc déduire leur dynamique des équations d'évolution de la mécanique quantique.

À l'observable quantique spin sont associés trois opérateurs S^x, S^y et S^z, correspondant aux trois composantes x, y et z. La composante est notée en exposant, et non pas en indice comme c'est généralement l'habitude, afin de réserver l'indice au numéro de la particule : l'opérateur spin dans la direction x, de la $n$ième particule sera par conséquent noté S_n^x. Le produit scalaire dans l'hamiltonien (12.2) doit être compris comme un produit d'opérateurs : $S_n^x S_{n+1}^x + S_n^y S_{n+1}^y + S_n^z S_{n+1}^z$.

Deux opérateurs relatifs à des sites différents agissent sur des espaces d'états différents de sortent qu'ils commutent entre eux. En revanche, les opérateurs relatifs à un même site ne commutent pas entre eux. Ils obéissent aux relations de commutation habituelles d'un moment cinétique

$$[S_n^x, S_n^y] = S_n^x S_n^y - S_n^y S_n^x = i\hbar S_n^z \quad , \tag{12.3}$$

et les relations qui s'en déduisent par permutation circulaire. En représentation d'Heisenberg les opérateurs dépendent du temps et leurs équations d'évolution temporelle sont

$$i\hbar \frac{\mathrm{d}\overrightarrow{S}_n}{\mathrm{d}t} = \left[\overrightarrow{S}_n, H\right] \quad . \tag{12.4}$$

En utilisant les relations de commutation, on obtient les équations d'évolution des opérateurs de spins :

$$\frac{\mathrm{d}S_n^x}{\mathrm{d}t} = \mathcal{J}\left\{S_n^y\left(S_{n-1}^z + S_{n+1}^z\right) - \left(S_{n-1}^y + S_{n+1}^y\right)S_n^z\right\} - A\left(S_n^z S_n^y + S_n^y S_n^z\right) \tag{12.5}$$

$$\frac{\mathrm{d}S_n^y}{\mathrm{d}t} = \mathcal{J}\left\{S_n^z\left(S_{n-1}^x + S_{n+1}^x\right) - \left(S_{n-1}^z + S_{n+1}^z\right)S_n^x\right\} + A\left(S_n^z S_n^x + S_n^x S_n^z\right) + \gamma B_x S_n^z \tag{12.6}$$

$$\frac{\mathrm{d}S_n^z}{\mathrm{d}t} = \mathcal{J}\left\{S_n^x\left(S_{n-1}^y + S_{n+1}^y\right) - \left(S_{n-1}^x + S_{n+1}^x\right)S_n^y\right\} - \gamma B_x S_n^y \quad . \tag{12.7}$$

Comme le traitement quantique est difficile, après avoir écrit les équations en tenant pleinement compte des effets quantiques, on peut en faire une approximation classique en considérant qu'elles donnent l'évolution des valeurs moyennes (au sens quantique) des composantes d'un *vecteur* de spin (et non plus d'un opérateur). Pour cela, on introduit un vecteur $\vec{\sigma}$ défini par la relation

$$\vec{S}_n = \hbar\sqrt{\mathcal{S}(\mathcal{S}+1)}\;\vec{\sigma}_n \quad , \tag{12.8}$$

dans laquelle on a introduit la norme du spin, déduite de la valeur propre $\hbar^2\mathcal{S}(\mathcal{S}+1)$ de l'opérateur $\vec{S}^2 = (S^x)^2 + (S^y)^2 + (S^z)^2$, $\mathcal{S}$ étant le nombre quantique de spin. Avec cette définition le vecteur $\vec{\sigma}$ est un vecteur unitaire. L'approximation classique ignore la quantification des composantes du spin qui est de plus traité comme un vecteur ordinaire dont les composantes sont de simples scalaires qui commutent entre eux. Un telle approximation est d'autant meilleure que $\mathcal{S}$ est grand. En effet, la mécanique quantique indique que les valeurs possibles pour S^z sont les valeurs comprises entre $-\mathcal{S}\hbar$ et $+\mathcal{S}\hbar$, par quanta de $\hbar$. Plus $\mathcal{S}$ est grand plus le nombre de valeurs permises augmente, et se rapproche d'un comportement classique pour lequel on a une infinité de valeurs permises. Écrites avec $\vec{\sigma}$, les relations de commutation (12.3) entre composantes du spin deviennent

$$[\sigma^x, \sigma^y] = \sigma^x\sigma^y - \sigma^y\sigma^x = i\sigma^z\frac{1}{\sqrt{\mathcal{S}(\mathcal{S}+1)}} \quad , \tag{12.9}$$

et l'on voit que dans la limite où $\mathcal{S}$ est grand, le commutateur $[\sigma^x, \sigma^y]$ tend vers zéro. Dans cette limite, les variables σ^x, σ^y, σ^z vont donc commuter, ce qui correspond bien à une limite classique.

En pratique, il n'est pas nécessaire d'avoir de très grandes valeurs de $\mathcal{S}$ pour que l'approximation classique pour la dynamique des spins donne de bons résultats. Ainsi, dans le cas de Mn^{2+} pour lequel $\mathcal{S} = 5/2$, l'expérience montre que cette approximation, qui semble *a priori* grossière, donne déjà des résultats très satisfaisants.

Avec cette approximation, les équations discrètes d'évolution des composantes de spin se déduisent des équations (12.5) à (12.7) par le changement d'échelle qui introduit $\overrightarrow{\sigma}$ et en cessant de distinguer deux produits de composantes qui ne diffèrent que par leur ordre. On obtient :

$$\frac{\mathrm{d}\sigma_n^x}{\mathrm{d}t} = S\mathcal{J}\left\{\sigma_n^y\left(\sigma_{n-1}^z + \sigma_{n+1}^z\right) - \left(\sigma_{n-1}^y + \sigma_{n+1}^y\right)\sigma_n^z\right\} - 2SA\sigma_n^y\sigma_n^z \quad (12.10)$$

$$\frac{\mathrm{d}\sigma_n^y}{\mathrm{d}t} = S\mathcal{J}\left\{\sigma_n^z\left(\sigma_{n-1}^x + \sigma_{n+1}^x\right) - \left(\sigma_{n-1}^z + \sigma_{n+1}^z\right)\sigma_n^x\right\} + 2SA\sigma_n^x\sigma_n^z + \gamma B_x\sigma_n^z \quad (12.11)$$

$$\frac{\mathrm{d}\sigma_n^z}{\mathrm{d}t} = S\mathcal{J}\left\{\sigma_n^x\left(\sigma_{n-1}^y + \sigma_{n+1}^y\right) - \left(\sigma_{n-1}^x + \sigma_{n+1}^x\right)\sigma_n^y\right\} - \gamma B_x\sigma_n^y \quad , \quad (12.12)$$

avec $S = \hbar\sqrt{\mathcal{S}(\mathcal{S}+1)}$.

Ces équations sont fondamentalement non-linéaires, comme on pouvait le prévoir à partir de l'hamiltonien de départ (12.2) qui comporte un terme d'interaction sous la forme d'un produit scalaire.

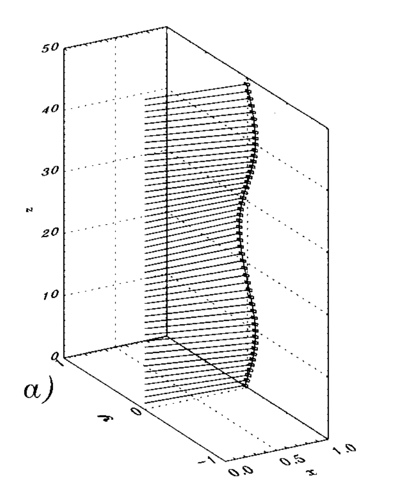
12.3 Magnons et solitons

Le système d'équations non-linéaires que nous avons obtenu pour les variables $\sigma_n^x(t)$, $\sigma_n^y(t)$, $\sigma_n^z(t)$ n'a pas de solution exacte connue actuellement et, pour l'étudier, nous allons devoir faire des approximations supplémentaires. Elles vont dépendre du type de solutions recherchées (fig. 12.2). C'est une situation choquante au premier abord car il semble que l'on choisisse ainsi le type d'équation que l'on souhaite obtenir, mais nous avons vu au chapitre 4 que c'est une démarche appropriée pour des équations non-linéaires qui ont souvent plusieurs familles de solutions assez différentes. En terme plus mathématique, cette méthode revient à faire une *sélection dans la base* permettant d'exprimer toutes les solutions. Ainsi, si l'on choisit par exemple un développement en ondes planes, on se restreint à la recherche de solutions non localisées.

12.3.1 Les magnons

Intéressons-nous tout d'abord aux solutions en ondes de spins, limitées à de petites variations autour de la position d'équilibre, en linéarisant les équations autour de l'état $\sigma_n^x = 1$, $\sigma_n^y = 0$, $\sigma_n^z = 0$.

On considère des valeurs de σ_n^y et σ_n^z qui sont d'ordre $\varepsilon \ll 1$ alors que la composante σ_n^x reste d'ordre 1 (fig. 12.2(a)). Le membre de droite de l'équation (12.10) est d'ordre ε^2 et, dans une approximation à l'ordre 1, on le néglige vis-à-vis du membre de gauche qui est d'ordre 1. Au contraire, dans les équations (12.11) et (12.12), tous les termes sont au même ordre ε. À l'ordre le



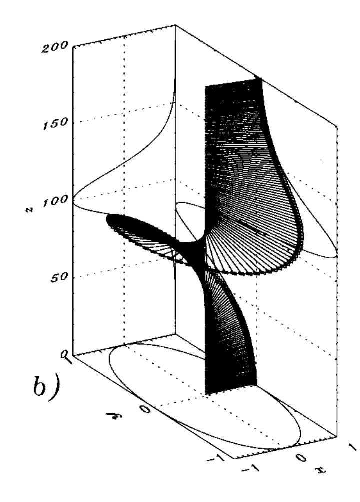


FIG. 12.2 – Représentation d'un magnon (a) et d'un soliton (b) dans une chaîne de spins dont la dynamique est décrite par l'hamiltonien (12.2). Les figures présentent également les projections des solutions sur les trois plans.

plus bas, on aboutit donc au système :

$$\frac{\mathrm{d}\sigma_n^x}{\mathrm{d}t} = 0 \tag{12.13}$$

$$\frac{\mathrm{d}\sigma_n^y}{\mathrm{d}t} = S\mathcal{J}\left(2\sigma_n^z - \sigma_{n-1}^z - \sigma_{n+1}^z\right) + 2SA\sigma_n^z + \gamma B_x \sigma_n^z \tag{12.14}$$

$$\frac{\mathrm{d}\sigma_n^z}{\mathrm{d}t} = S\mathcal{J}\left(\sigma_{n-1}^y + \sigma_{n+1}^y - 2\sigma_n^y\right) \qquad - \gamma B_x \sigma_n^y \quad . \tag{12.15}$$

Ce système, linéaire par construction, possède des solutions en « ondes planes » de vecteur d'onde q et de pulsation ω de la forme

$$\sigma_n^y = Y\ e^{i(qna-\omega t)} \qquad \text{et} \qquad \sigma_n^z = Z\ e^{i(qna-\omega t)} \quad , \tag{12.16}$$

où a est le pas du réseau, et Y, Z sont les amplitudes des composantes de l'onde. En reportant ces deux expressions dans les équations ci-dessus et en simplifiant par $e^{i(qna-\omega t)}$, on obtient le système homogène

$$-i\omega Y = (S\mathcal{J}[2 - 2\cos(qa)] + \gamma B_x + 2SA)\ Z \tag{12.17}$$

$$-i\omega Z = (S\mathcal{J}[2\cos(qa) - 2] - \gamma B_x) \qquad Y \quad , \tag{12.18}$$

qui ne possède une solution non identiquement nulle qu'à la condition que son déterminant soit nul, c'est-à-dire :

$$\omega^2 = [2S\mathcal{J}(1 - \cos(qa)) + \gamma B_x]\,[2S\mathcal{J}(1 - \cos(qa)) + \gamma B_x + 2AS] \quad . \tag{12.19}$$

Cette relation constitue la relation de dispersion des magnons. Elle se simplifie fortement si le coefficient d'anisotropie A est supposé nul. On trouve alors une relation de dispersion qui a une forme habituelle

$$\omega = \pm \left[\gamma B_x + 4S\mathcal{J}\sin^2\left(\frac{qa}{2}\right)\right] \quad , \tag{12.20}$$

avec une bande interdite, pour les fréquences entre 0 et γB_x, dont la largeur est contrôlée par le champ magnétique extérieur.

12.3.2 Les solitons

Cherchons maintenant un second type de solutions dans lequel on veut pouvoir tenir compte des mouvements de grande amplitude (fig. 12.2(b)). La linéarisation étant à proscrire, nous allons avoir recours à l'approximation des milieux continus. Comme le vecteur $\overrightarrow{\sigma}$ est unitaire, ses trois composantes ne sont pas indépendantes. Cela signifie que deux variables suffisent à le caractériser en chaque site. On introduit [100, 156] donc deux variables angulaires représentées sur la figure 12.3 :

- θ qui caractérise l'angle que fait le spin avec le plan xy. Il est naturel de prévoir *a priori* que cet angle sera d'autant plus faible que l'anisotropie sera forte.
- ϕ qui caractérise la rotation dans le plan xy.

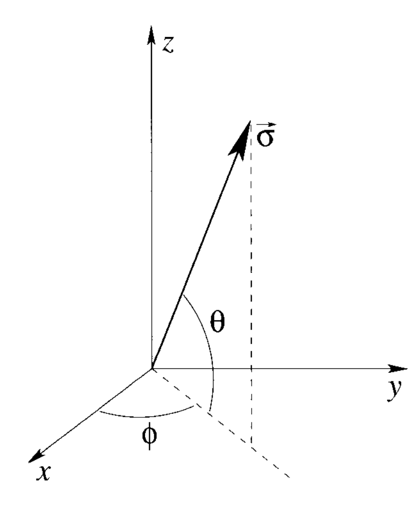


FIG. 12.3 – Définition des angles θ et ϕ permettant de caractériser le vecteur unitaire associé à chaque spin.

L'état de base, ou état fondamental, correspond au cas $\phi = \theta = 0$. Les trois composantes du vecteur unitaire $\overrightarrow{\sigma}$ s'écrivent sous la forme :

$$\sigma_n^x = \cos\theta_n \cos\phi_n \tag{12.21}$$
$$\sigma_n^y = \cos\theta_n \sin\phi_n \tag{12.22}$$
$$\sigma_n^z = \sin\theta_n \quad . \tag{12.23}$$

On reporte ces expressions dans les équations du mouvement (12.10) à (12.12), écrites dans l'approximation des milieux continus, en introduisant $\theta(z,t)$ et $\phi(z,t)$ et en exprimant les quantités aux sites $n \pm 1$ par des expressions du type :

$$\cos\theta_{n\pm1} = \cos\left(\theta_n \pm a\frac{\partial\theta}{\partial z} + \frac{a^2}{2}\frac{\partial^2\theta}{\partial z^2} + \cdots\right) \tag{12.24}$$
$$\simeq \cos\theta_n - \left(\pm a\frac{\partial\theta}{\partial z} + \frac{a^2}{2}\frac{\partial^2\theta}{\partial z^2}\right)\sin\theta_n - \frac{a^2}{2}\left(\frac{\partial\theta}{\partial z}\right)^2 \cos\theta_n \quad . \tag{12.25}$$

Les équations prennent une forme plus simple si on utilise les variables sans dimension $\xi = z\sqrt{2A/\mathcal{J}a^2}$ et $\tau = t\,(2AS)$ et si on définit la quantité $b = \gamma B_x/(2AS)$. On aboutit au système en θ et ϕ

$$\cos\theta\ \phi_\tau = -\,\theta_{\xi\xi} + \left(1 - \phi_\xi^2\right)\sin\theta\cos\theta + b\sin\theta\cos\phi \tag{12.26}$$
$$\theta_\tau = \phi_{\xi\xi}\cos\theta - 2\theta_\xi\phi_\xi\sin\theta - b\sin\phi \quad . \tag{12.27}$$

Comme ce système d'équations aux dérivées partielles couplées n'est toujours pas soluble exactement, il est nécessaire d'envisager des approximations supplémentaires. Dans le cas où l'anisotropie A est forte, l'angle θ restera faible, limitant l'essentiel de l'évolution au plan orthogonal à la chaîne. On pourra donc supposer dans ce cas que θ est d'ordre $\varepsilon \ll 1$.

Par ailleurs, comme l'on cherche des solutions solitons, on s'intéresse aux solutions à profil constant, fonctions de la variable $\xi - v\tau$. En considérant des vitesses v d'ordre unité, on voit que les dérivées par rapport aux deux variables ξ et τ seront du même ordre, et, dans la mesure où nous avons fait l'approximation des milieux continus, nous devons supposer que la dérivée par rapport à ξ est d'ordre ε, ce qui implique que $\partial/\partial\tau$ est aussi d'ordre ε.

Enfin, nous allons nous placer dans le cas où b est d'ordre ε^2, ce qui limite les valeurs du champ et du paramètre d'anisotropie acceptables, mais est tout à fait cohérent avec le choix de la limite classique puisque $\mathcal{S} \gg 1$.

Si on se limite uniquement aux termes dominants, les équations (12.26) et (12.27) se réduisent à

$$\phi_\tau = \theta \qquad \text{en notant qu'à l'ordre } \varepsilon \quad \sin\theta \simeq \theta \tag{12.28}$$
$$\theta_\tau = \phi_{\xi\xi} - b\sin\phi \quad . \tag{12.29}$$

En combinant les deux équations, on obtient l'équation différentielle du deuxième ordre :

$$\phi_{\tau\tau} - \phi_{\xi\xi} + b \sin\phi = 0 \quad . \tag{12.30}$$

On reconnaît l'équation de sine-Gordon pour la variable ϕ.

Il a donc été possible de parvenir à une équation ayant des solutions solitons, au prix d'une série d'approximations. C'est une situation typique de ce qui se passe fréquemment lorsque l'on essaie de traiter un système réel, et que l'on retrouve dans bien d'autres situations physiques. Le traitement des phénomènes non-linéaires se distingue essentiellement par la procédure que l'on suit au lieu de se contenter de l'approche la plus courante, la linéarisation :

- Un traitement qualitatif fait tout d'abord apparaître différentes solutions : ondes de spins ou solitons topologiques.
- Dans un deuxième temps, on procède à une simplification des équations, adaptée au type de solution cherchée, afin de permettre leur résolution.
- Il ne faut cependant pas oublier de vérifier la validité des résultats que l'on obtient à partir de ces équations approchées. C'est ce que nous allons faire maintenant.

12.4 Validité de l'approximation de sine-Gordon

Il existe deux alternatives pour vérifier les approximations, la simulation numérique des équations d'origine et la comparaison avec l'expérience.

12.4.1 Ordres de grandeur

La solution soliton de l'équation de sine-Gordon (SG) (12.30) de vitesse v est

$$\phi_{SG} = 4 \arctan \exp \left[\frac{\sqrt{b}(\xi - v\tau)}{\sqrt{1-v^2}} \right] \tag{12.31}$$

qui permet d'obtenir l'expression de θ grâce à l'équation (12.28),

$$\theta_{SG} = -2 \frac{v\sqrt{b}}{\sqrt{1-v^2}} \operatorname{sech} \left[\frac{\sqrt{b}(\xi - v\tau)}{\sqrt{1-v^2}} \right] \quad . \tag{12.32}$$

Cette solution correspond à une rotation de 2π de la variable ϕ, accompagnée d'une distorsion locale en θ (cf. figs. 12.4 et 12.5). Au cœur du soliton, les spins sortent du plan xy, contrairement à ce que l'on obtient dans le cas de la chaîne de pendules.

On peut tout d'abord vérifier la cohérence des ordres de grandeurs :

- ϕ variant entre 0 et 2π d'après la formule (12.31), on a bien ϕ d'ordre 1.

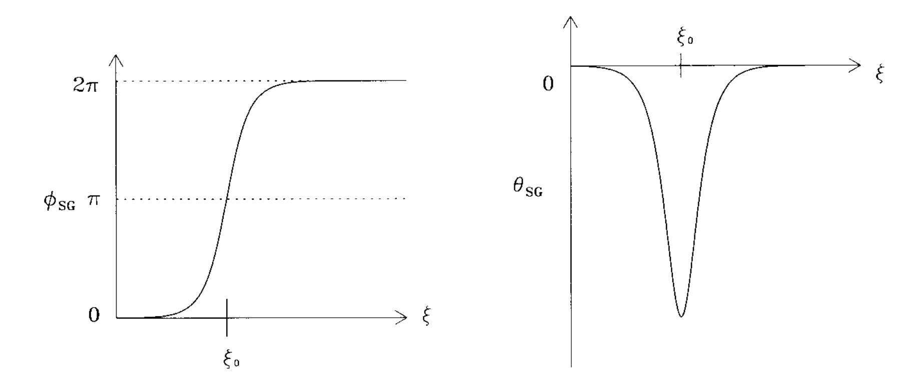


FIG. 12.4 – Représentation des solutions ϕ_{SG} et θ_{SG} de la chaîne de spins couplés, centrées autour du site ξ_0.

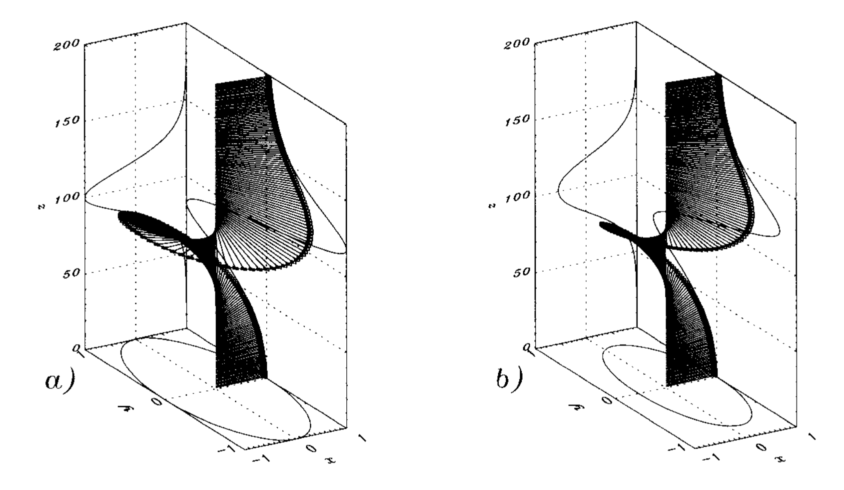


FIG. 12.5 – Représentations tridimensionnelles des solutions statique (a) et dynamique (b), avec leurs projections sur les trois plans. La projection sur le plan xy montre qu'au centre de la solution dynamique le spin ne passe pas par une valeur exactement opposée à sa valeur au repos, contrairement à ce qui se passe pour la solution statique. Pour cette solution, la variation du vecteur $\vec{\sigma}$ quand on passe d'un côté à l'autre de la solution ne correspond plus à une rotation complète autour de l'axe de la chaîne.

- La dérivée de ϕ par rapport à la variable spatiale ξ donne un facteur $\sqrt{b}$; comme b est supposé d'ordre ε^2, $\partial\phi/\partial\xi$ est bien d'ordre ε.
- La solution θ, comportant également un terme $\sqrt{b}$, est donc d'ordre ε.
- La dérivée de θ par rapport à la variable spatiale ξ étant proportionnelle à b, elle est donc bien d'ordre ε^2.

Il faut noter que, pour que cette cohérence subsiste, il faut que le facteur $1/\sqrt{1-v^2}$ de la variable θ ne devienne pas trop grand ; cela signifie que l'approximation sera beaucoup plus justifiée à faible vitesse.

On peut en outre vérifier que le soliton *statique* de SG pour la variable ϕ (vérifiant $\phi_{\xi\xi} = b \sin \phi$), associée à $\theta = 0$, est une solution exacte du système d'équations (12.26) et (12.27), obtenu dans le cadre de la limite des milieux continus mais *sans* les approximations ayant conduit à l'équation de SG. Dès que la vitesse n'est plus nulle la solution de l'équation SG n'est plus une solution exacte pour la chaîne de spins, mais on peut chercher à déterminer dans quelle mesure elle reste acceptable en l'utilisant comme condition initiale pour des simulations numériques des équations discrètes (12.10)–(12.11)–(12.12).

12.4.2 Simulations numériques

Pour vérifier la validité des solutions, il est préférable de repartir des équations qui décrivent le système physique avec le minimum d'approximations. L'idéal serait d'utiliser les équations quantiques, mais leur traitement, même numérique, n'est pas possible. Les équations (12.10)–(12.11)–(12.12) sont en revanche bien adaptées aux simulations numériques car elles ne représentent que le premier degré d'approximation après les équations quantiques, et par ailleurs, elles sont mieux adaptées au traitement numérique que les équations aux dérivées partielles que nous en avons tirées ensuite. Celles-ci sont préférables pour la résolution analytique, mais si on voulait les étudier par simulation numérique il faudrait à nouveau discrétiser la variable d'espace. Il est plus naturel et plus simple de partir directement des équations discrètes.

Il faut cependant noter qu'un tel test de la validité de la solution ne peut suffire à conclure à l'existence de solitons dans un matériau magnétique unidimensionnel car les équations que l'on simule sont déjà approchées par rapport aux équations quantiques, et l'hamiltonien (12.2) dont les équations quantiques dérivent, n'est lui même qu'une représentation incomplète de la réalité (il néglige par exemple des interactions entre seconds voisins ou le couplage des degrés de liberté de spin avec les déformations du réseau, qui modifient l'intégrale d'échange). Seule l'expérience peut trancher, mais les simulations sont néanmoins très utiles car, avant de lancer une expérience complexe, il faut déterminer les conditions optimales pour qu'elle réussisse. Les tests numériques sont essentiels sur ce point et permettent également de fournir des données pour l'analyse des résultats expérimentaux.

Si la simulation numérique ne peut remplacer l'expérience, elle ne peut pas non plus dispenser de l'analyse théorique que nous avons faite. Chercher numériquement des solitons dans un modèle aussi complexe que la chaîne de spins a peu de chances d'aboutir. Il est important de disposer d'une condition initiale approchée.

Le calcul numérique montre que les solutions de type SG sont de très bonnes solutions lorsque b et v sont faibles, comme nous l'avions prévu. Mais la simulation détecte l'existence de *branches de solutions supplémentaires.*

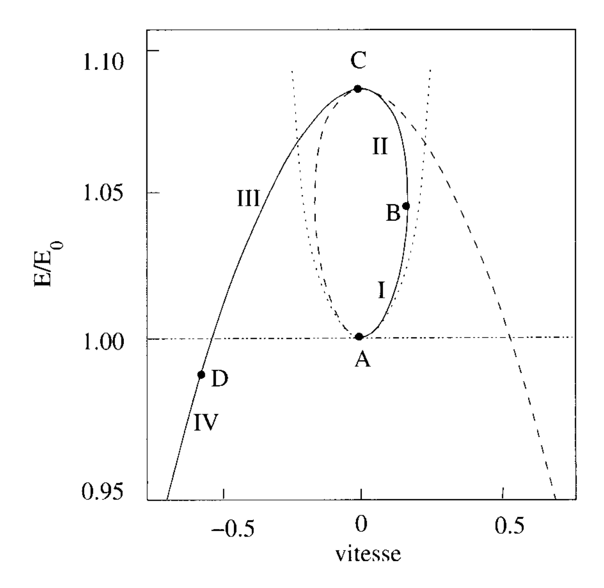


FIG. 12.6 – Représentation du rapport de l'énergie E des différentes branches de solutions à l'énergie E_0 d'un soliton sine-Gordon au repos en fonction de la vitesse v des solitons (adapté de la référence [133]). La courbe continue (resp. en tiret) correspond au cas où la déviation hors du plan θ est négative (resp. positive). Les courbes en pointillés pour $v > 0$ ou $v < 0$ représentent la relation énergie-vitesse pour un soliton sine-Gordon.

La figure 12.6 montre que, pour une valeur de l'énergie, deux valeurs de la vitesse sont possibles dans chaque sens de propagation [157, 133]. Pour deux solutions de vitesses opposées les déviations θ hors du plan xy sont de signes opposés. Pour certaines valeurs de la vitesse on peut avoir jusqu'à trois valeurs pour l'énergie, qui correspondent à trois solutions différentes.

Les diverses branches que l'on observe sur la figure 12.6 correspondent à des solutions différentes mais ayant pourtant qualitativement la même forme : une évolution semblable à un kink pour la variable ϕ, associée à un pulse pour la variable θ, comme représenté sur la figure 12.4. Pour simplifier la discussion, limitons nous aux situations où la déviation hors du plan θ est négative, ce qui correspond à une vitesse positive (cf. (12.32)). La figure 12.6 montre qu'il existe une première branche, notée I, entre les points A et B, sur laquelle l'énergie est une fonction croissante de la vitesse, tout à fait analogue à celle de l'équation de SG. Au contraire, les branches II, III et IV mettent en évidence des déviations importantes par rapport à la solution soliton de SG puisque, notamment, l'énergie est une fonction décroissante du module de la vitesse.

En outre, une étude précise met en évidence qu'entre les points notés A et D sur la figure, la déviation θ passe de la valeur 0 à $\pi/2$. À ce niveau la nature du soliton a fondamentalement changé par rapport au soliton SG. Au lieu d'une rotation autour de l'axe de la chaîne, on observe un mouvement des spins qui se fait dans un plan et le soliton perd son caractère topologique.

On constate par exemple l'existence de deux solutions statiques ; la solution SG correspondant à $\theta = 0$ que nous avons déjà évoquée (point A sur la figure 12.6) mais il y a aussi une solution plus énergétique comme le montre la figure 12.6 au point C. Pour cette seconde solution, l'angle θ n'est plus nul et la rotation du spin se fait par un passage hors du plan xy.

Les simulations numériques ont donc permis de révéler un monde beaucoup plus riche que celui que la résolution analytique avait découvert. Cependant, les calculs analytiques, malgré toutes les approximations que nous avons introduites, ont conduit à des solutions qualitativement correctes et avaient, en particulier, le mérite de mettre en évidence la possibilité d'avoir, dans une chaîne de spins, des excitations localisées spatialement qui sont totalement différentes des magnons. Les simulations numériques ont de plus montré qu'un passage progressif entre des solutions de type topologique et des solutions localisées non topologiques était possible [133].

12.4.3 Observations expérimentales

Les observations expérimentales attestent de la présence de solitons ou de magnons dans les systèmes magnétiques et valident ainsi les études analytiques et numériques. Pour cela on utilise des expériences de résonance magnétique nucléaire (RMN) et de diffusion inélastique des neutrons.

La résonance magnétique nucléaire (RMN)

Lorsque l'on place un atome de spin $\overrightarrow{S}$ dans un champ magnétique $\overrightarrow{B}$ statique et parallèle à l'axe z, son énergie est

$$U = -\gamma B_z \, S_z \quad . \tag{12.33}$$

Comme les composantes du spin S_z sont quantifiées ($\pm 1/2\hbar$, $\pm 3/2\hbar$ et $\pm 5/2\hbar$ dans le cas de l'ion Mn^{2+}), on obtient en présence du champ magnétique une série de niveaux d'énergie distants de $\gamma\hbar B_z$.

Un champ magnétique oscillant à une fréquence que nous noterons ω_0 est susceptible de provoquer une transition entre ces niveaux si $\hbar\omega_0 = \gamma\hbar B_z$. Elle se traduit par un pic d'absorption d'énergie du champ oscillant lorsqu'on réalise un balayage en fréquence.

Dans un solide, où l'on a une assemblée d'atomes possédant un spin, la largeur de la raie RMN d'absorption est proportionnelle à l'inverse du temps (noté T_2) pendant lequel deux spins individuels sont en phase. On retrouve l'idée de corrélation évoquée dans le chapitre 10 sur les ferroélectriques.

Un soliton passant sur un site va retourner temporairement le spin de ce site et donc contribuer à réduire cette largeur T_2 ; c'est l'une des solutions utilisées pour mettre en évidence la présence de solitons dans les systèmes magnétiques.

La diffusion inélastique de neutrons

Cette seconde méthode est très utilisée car elle donne une mesure directe du facteur de structure dynamique $\widetilde{\mathbf{S}}_\perp(q,\omega)$, puisque la section efficace de diffusion des neutrons est proportionnelle à ce facteur donné par

$$\widetilde{\mathbf{S}}_\perp(q,\omega) = \int \mathrm{d}^3\vec{r} \int \mathrm{d}t\ \langle S_\perp(0,0) S_\perp(\vec{r},t)\rangle\ e^{i(\omega t - \vec{q}.\vec{r})} \quad , \qquad (12.34)$$

où $S_\perp$ correspond à la composante du spin orthogonale à la quantité de mouvement transférée entre le neutron et le réseau de spins. La mesure du facteur de structure dynamique est donc une mesure de la fonction de corrélation spatiale des spins.

Comme nous l'avions indiqué dans le chapitre 10 sur les ferroélectriques, la présence d'excitations de type soliton se traduit par une « signature » caractéristique dans le facteur de structure $\widetilde{\mathbf{S}}(q,\omega)$, le pic central situé dans la zone des faibles valeurs de vecteur d'onde q et de fréquence ω.

La thermodynamique du gaz de solitons dans le cas du modèle de SG montre que la largeur du pic central est :

- proportionnelle à q, les autres variables T et B étant fixées ;
- proportionnelle à T, les autres variables q et B étant fixées ;
- proportionnelle à $\sqrt{B}$, les autres variables q et T étant fixées.

L'amplitude de ce pic est, par ailleurs, exponentielle en T et $B^{-1/2}$.

Dans le cas d'un composé magnétique 1D, ces résultats sont assez bien vérifiés expérimentalement. À partir des paramètres microscopiques connus du composé $CsNiF_3$, le calcul donne une énergie E_0 des solitons valant $E_0/k_B = 34$ K. La diffusion des neutrons, quant à elle, conduit à la valeur $E_0/k_B = 28$ K. Si l'accord n'est qu'approximatif et met en évidence les limites du modèle de SG, il confirme cependant de manière exemplaire l'utilité de ces modèles de solitons car le pic central ne peut absolument pas être expliqué en se limitant aux ondes linéaires de spins. Récemment, des expériences par résonance de spin électronique [16] ont permis de mettre en évidence un autre type de solitons, les breathers, dans le benzoate de cuivre pour lequel le nombre quantique de spin n'est que de 1/2, ce qui implique que l'approximation quasi-classique pour les équations de mouvement ne s'applique plus. Ces modes breathers sont décrits par une version quantique du modèle de SG, ce qui montre qu'un passage à la limite classique n'est pas une condition nécessaire pour l'existence de solitons dans une chaîne magnétique.

Dans les systèmes magnétiques, les résultats expérimentaux sont en bien meilleur accord quantitatif avec la théorie que dans les matériaux ferroélectriques car les solitons magnétiques, qui sont aussi des parois de domaines, sont

larges par rapport au pas de réseau (tout au moins quand ils concernent des spins assez élevés pour que l'approximation quasi-classique soit valable). Ils ne sont en général pas piégés par les effets de discrétisation et l'image d'un gaz parfait de solitons est assez proche de la réalité.

Cependant, la largeur des parois de domaines magnétiques dépend de la température. En effet, le terme de potentiel de substrat de l'équation de SG est en fait un potentiel effectif dont l'amplitude décroît avec la température car les fluctuations thermiques des spins tendent à réduire leur alignement sous l'influence du champ magnétique extérieur. À très basse température, ces fluctuations deviennent très faibles et l'effet du champ extérieur est perçu beaucoup plus fortement. L'augmentation d'amplitude du potentiel de substrat se traduit par une diminution de la largeur des solitons (cf. (2.22)). À très basse température, on peut donc s'attendre à percevoir les effets de discrétisation, d'autant plus que les fluctuations thermiques ne vont pas conduire à des sauts des solitons au-dessus des maxima du potentiel de Peierls. C'est en effet ce que donne l'expérience.

Dans des films minces cristallins de grenats Yttrium-Fer (YIG pour Yttrium-Iron-Garnet) l'utilisation de sondes à effet Hall submicroniques, très sensibles à de petits changements de flux magnétique, tels que ceux causés par les mouvements de parois de domaines, permet de détecter [116] de très petits déplacements des parois. On observe alors que celles-ci se déplacent par sauts dont la taille est exactement celle du pas du réseau cristallin dans la direction de déplacement de la paroi (1,75 nm). Cette expérience fournit ainsi une mise en évidence directe du potentiel de Peierls-Nabarro (PN) dont nous avons parlé à propos des dislocations au chapitre 9. Les systèmes magnétiques sont très favorables pour ce type d'études puisque le déplacement des parois est associé à des variations locales de champ magnétiques qui peuvent être directement mesurées.

12.5 Solitons dans les chaînes de spins antiferromagnétiques

La situation des matériaux antiferromagnétiques est très particulière car, dans ce cas, comme le montre la figure 12.7, un soliton correspond à une rotation des spins d'un angle π. Le renversement des spins, qui persiste sur un site après le passage d'un soliton, est beaucoup plus facile à détecter expérimentalement grâce à des expériences de diffusion de neutrons ou de RMN, que le basculement des spins par les solitons des matériaux ferromagnétiques qui ne dure que pendant le passage du soliton sur un site [30].

Le cas antiferromagnétique met en évidence une écriture nouvelle et intéressante de l'approximation des milieux continus car, comme le montre la figure 12.7, au centre du soliton le spin s'inverse d'un site au suivant, ce qui semble interdire toute approximation des milieux continus. L'astuce est de

considérer *deux* champs couplés : celui formé par les spins des sites pairs $S_p(x,t)$ et celui qui correspond aux sites impairs $S_i(x,t)$. C'est pour chacun de ces deux sous-réseaux que l'on fait l'hypothèse de variations suffisamment lentes. Les deux champs sont ensuite traités avec des méthodes très voisines de celles vues pour les matériaux ferromagnétiques, les calculs étant cependant plus compliqués puisque l'on obtient un système de *quatre* équations couplées non-linéairement, liant quatre champs : θ_p et ϕ_p d'une part, θ_i et ϕ_i, d'autre part. Afin de pouvoir tirer des informations de ce système assez inextricable, il faut réussir à déterminer les variables de champs dont les ordres de grandeurs vont être suffisamment différents [106], de manière à pouvoir découpler, ne serait-ce que partiellement les équations. Les études théoriques [158], très bien confirmées par les expériences, ont ainsi pu mettre en évidence une très grande variété d'excitations.

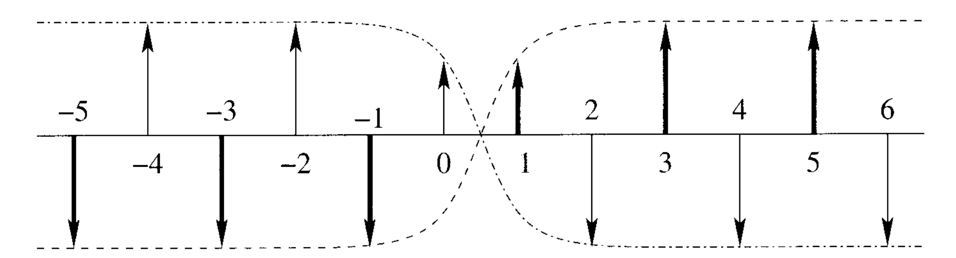


FIG. 12.7 – Représentation schématique du soliton topologique de la chaîne antiferromagnétique. Les spins des sites impairs ont été marqués en trait fort, pour qu'il soit plus facile de les distinguer, mais tous les atomes du réseau portent des spins identiques. Les lignes en traits interrompus indiquent les variations des deux champs associés aux spins pairs et impairs quand on effectue une approximation de milieu continu pour un matériau antiferromagnétique.

Conclusion

Les matériaux magnétiques fournissent des exemples intéressants aussi bien pour la théorie que pour les applications, dans lesquels des solitons mobiles existent dans un système microscopique. Ils sont propices à des mesures précises qui vérifient très bien les prévisions théoriques, notamment dans le régime des basses températures où les fluctuations thermiques sont limitées.

Chapitre 13

Solitons dans les polymères conducteurs

L'UTILISATION DU CONCEPT de soliton dans le cadre de la physique des polymères constitue un exemple spectaculaire d'approche interdisciplinaire extrêmement fructueuse. Leur existence a en effet d'abord été proposée par des physiciens théoriciens, spécialistes de mécanique quantique et de théorie des champs [71]. Les chimistes ont alors tout mis en œuvre pour synthétiser des matériaux ayant les propriétés désirées, avant que des physiciens expérimentateurs étudient les propriétés de ces solitons et confirment effectivement les prévisions théoriques. Toute cette succession d'étapes trouva son apogée dans le prix Nobel de chimie, décerné en octobre 2000 à Alan J. Heeger, Alan G. MacDiarmid et Hideki Shirakawa pour leur travaux sur la conduction électrique des plastiques conducteurs qui est assurée par des solitons.

13.1 Les matériaux

13.1.1 Le polyacétylène

Le polymère le plus simple est le polyacétylène qui est devenu le prototype des polymères conducteurs. Il possède une structure linéaire, formée d'unités CH. Le carbone, en hybridation sp^2, a une distribution électronique permettant la formation de trois liaisons chimiques avec les atomes voisins, à 120° les unes des autres dans un plan. Cette configuration électronique est complétée par un électron, appelé électron π, occupant une orbitale p, orthogonale à ce plan et permettant à l'atome de carbone d'établir une quatrième liaison. Une liaison chimique covalente correspond à la mise en commun de deux électrons. Lorsqu'on forme une chaîne $(CH)_n$, si l'on établit une simple liaison entre les atomes on parvient à un total de trois liaisons par atome carbone, utilisant donc trois des quatre électrons disponibles sur le carbone pour se lier à ses voisins. Le quatrième électron disponible sur chaque carbone est utilisé pour

former une double liaison avec l'un des atomes de carbone voisins. En réalisant une chaîne d'atomes C, reliés alternativement par une simple et une double liaison, chacun d'eux étant lié par ailleurs à un atome H par une liaison simple, on obtient une configuration qui correspond au nombre de liaisons chimiques que chaque type d'atome peut former (une pour H et quatre pour C). Les doubles liaisons interdisant les rotations, deux agencements différents des carbones sont envisageables, comme le montre la figure 13.1 : les configurations trans et cis. La configuration trans correspond à une chaîne carbonée en zig-zag, alors que dans la configuration cis une liaison $C - C$ sur deux est parallèle à l'axe de la chaîne. Les configurations représentées sur la figure 13.1 sont schématiques car, en réalité, les doubles liaisons sont légèrement plus courtes que les simples liaisons.

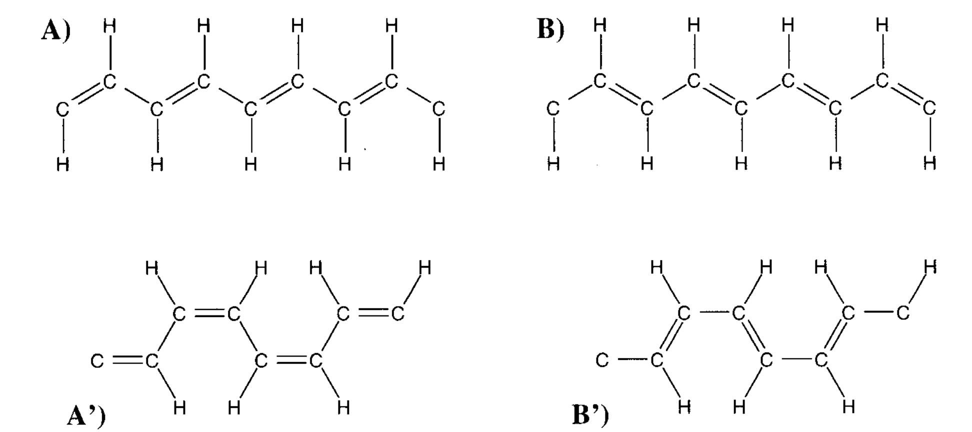


FIG. 13.1 – Représentation des deux configurations trans (A et B) et des deux configurations cis (A' et B') du polyacétylène.

Pour chacune des géométries de la chaîne de carbone, correspondant à la configuration trans ou à la configuration cis, quand on positionne les doubles liaisons, on peut envisager deux possibilités, comme représenté sur la figure 13.1. Dans la géométrie correspondant à la configuration cis, les deux possibilités notées A' et B' sur la figure, correspondent à deux situations légèrement différentes puisque les doubles liaisons peuvent être parallèles à l'axe de la chaîne ou non. Ces deux types de configurations cis ont des énergies légèrement différentes.

Au contraire, dans la géométrie trans de la chaîne carbonée, les deux possibilités marquées A et B sur la figure 13.1 sont strictement identiques puisqu'elles se correspondent par un plan de symétrie. Elles ont donc la même énergie. Il pourrait sembler inutile de mentionner l'existence de ces deux types de configuration trans, et ce serait en effet le cas s'il n'existait pas des situations où *les deux types de configuration trans existent sur la même molécule.*

Cela se traduit par un défaut dans l'alternance des liaisons comme le montre la figure 13.2. L'atome de carbone central, bien que possédant un électron non apparié, est toujours électriquement neutre.

Portion A défaut Portion B

FIG. 13.2 – Représentation du défaut liant les deux types de configuration trans de la chaîne de polyacétylène.

Quand on examine la figure 13.2 on constate que le trans–polyacétylène est un système physique qui peut exister sous deux formes énergétiquement dégénérées qui peuvent être raccordées par un « défaut » localisé spatialement, qui interpole entre ces deux états fondamentaux dégénérés du système. Cette situation est *exactement la situation que nous avons décrite quand nous avons présenté les solitons topologiques*. Cela suggère l'idée que ce « défaut » est peut-être un soliton topologique. Et, si c'est bien le cas, on peut penser qu'il peut être mobile le long de la molécule. C'est cette idée qui a conduit à un prix Nobel de chimie… après un important travail de recherche interdisciplinaire pour la valider théoriquement et expérimentalement.

La découverte de cette possibilité remonte aux travaux de chimistes pendant les années 1960 ; cependant ceux-ci, pensant que le défaut était statique, ne lui avaient pas accordé l'importance qu'elle méritait. En effet, le schéma de la figure 13.2 suppose que la largeur du défaut est réduite à une maille, ce qui suggère que les effets de discrétisation vont piéger cette structure localisée. Une étude plus élaborée montre que ce n'est pas le cas, puisque le défaut s'étend sur une quinzaine de mailles et qu'il est donc susceptible d'être très mobile.

13.1.2 Les autres polymères conducteurs

C'est la présence de liaisons π conjuguées, autorisant un basculement des doubles liaisons, qui est à l'origine de cette propriété remarquable du polyacétylène. Il existe cependant de nombreux autres polymères conjugués susceptibles de posséder des solutions solitons. L'un des plus étudiés, le polythiophène, permet aussi deux positionnements des doubles liaisons (cf. fig. 13.3) mais, comme pour le cis-polyacétylène, ces deux états ne sont pas exactement dégénérés.

FIG. 13.3 – Représentation des deux structures du polythiophène A et B.

Dans une telle situation, où les deux niveaux d'énergie sont différents avec $E_B > E_A$, la plus grande partie de la chaîne est dans l'état fondamental A mais une petite zone peut tout à fait être dans l'état B ; l'énergie du système sera alors une fonction croissante de la largeur de cette zone. Cette dépendance implique que les deux régions de transition entre les deux états A et B sont liées. Leur comportement est analogue à celui d'une paire de soliton-antisoliton par analogie directe avec la notion introduite dans les chapitres sur l'équation de SG ou sur le modèle ϕ^4.

Comme la dégénérescence des états n'est pas exacte, la paire soliton-antisoliton aura une durée de vie finie qui peut cependant être allongée par un *dopage* du polymère. D'une façon générale, le dopage est nécessaire si l'on souhaite que le soliton mobile soit un porteur de charge puisque le défaut dans l'alternance des liaisons est électriquement neutre. Nous verrons que, si l'on ajoute des impuretés susceptibles de fournir un électron par ionisation ($D \to D^+ + e^-$), cet électron peut s'associer au soliton qui devient alors effectivement un porteur de charge mobile. Il a été possible ainsi de synthétiser des polyacétylènes conducteurs possédant une conductivité égale au dixième de celle du cuivre, l'un des meilleurs conducteurs à notre disposition. Il a fallu pour cela une collaboration étroite entre théoriciens et expérimentateurs.

13.2 Le modèle physique du polyacétylène

Si l'on veut dépasser le stade de la description qualitative précédente, il faut disposer d'un modèle physique du polymère. L'alternance simple-double liaison est en effet une représentation chimique qui ne permet pas une étude quantitative, notamment en ce qui concerne l'extension spatiale du défaut dans l'alternance. Le traitement complet du modèle étant très complexe, nous allons en dégager les idées principales en reprenant l'approche proposée [142] par Su, Schrieffer et Heeger (SSH). Les éléments essentiels à introduire dans un modèle sont :

- les électrons π qui forment les doubles liaisons, puisque c'est leur basculement sur une liaison ou une autre, qui correspond à l'existence des deux formes A et B ;
- les distorsions de la chaîne carbonée. En effet, la simple et la double liaison n'ayant pas la même longueur, le basculement des électrons π d'une liaison vers une autre est couplé à une distorsion du réseau.

L'hamiltonien de SSH comporte donc deux parties, l'une pour la dynamique de la chaîne carbonée formée par les liaisons dites liaisons σ entre les atomes de carbone, et l'autre pour les électrons π,

$$H = H_\sigma + H_\pi \quad . \tag{13.1}$$

La première étape est d'établir un modèle physique satisfaisant de la chaîne dimérisée (c'est-à-dire dont la maille élémentaire est doublée par l'alternance simple–double liaison) en l'absence de soliton. Ensuite, il faudra tenir compte de la présence d'un défaut dans l'alternance des liaisons.

13.2.1 La dynamique des atomes

L'idée de SSH était d'établir le modèle le plus simple possible, et pour cela ils n'ont considéré qu'une composante de la distorsion de réseau, celle qui est dans la direction de la chaîne. Notons U_n le déplacement du $n$ième groupement CH le long de l'axe de la molécule par rapport à la position qu'il occupe dans la structure régulière où toutes les liaisons ont la même longueur. L'hamiltonien le plus simple, susceptible de décrire la dynamique de la chaîne carbonée, est

$$H_\sigma = \sum_n \frac{P_n^2}{2m} + \frac{1}{2}K\left(U_n - U_{n+1}\right)^2 \tag{13.2}$$

en introduisant P_n la quantité de mouvement du $n$ième groupement CH, m sa masse et K la constante de couplage entre groupements. La distorsion du réseau due à la formation des doubles liaisons est faible puisque qu'elle est d'environ 0,04 Å qu'il faut comparer à la longueur de la projection d'une liaison $C - C$ sur l'axe de la chaîne qui vaut a = 1,22 Å. L'énergie de couplage peut donc être prise sous forme d'une approximation harmonique.

13.2.2 L'hamiltonien électronique

Compte tenu de la masse des groupements CH, il était possible de les décrire de manière satisfaisante par un hamiltonien classique. On ne peut pas faire cette hypothèse dans le cas des électrons. La manière la plus simple d'écrire leur contribution à l'hamiltonien est d'utiliser la seconde quantification. On introduit pour cela les opérateurs de création $c_n^\dagger$ et d'annihilation c_n d'un électron au site n. L'opérateur $c_n^\dagger c_n$ est l'opérateur nombre d'électrons au site n tandis que l'opérateur $c_{n+1}^\dagger c_n$ détruit un électron au site n pour le créer au site $n+1$: il représente donc un transfert de l'électron du site n vers le site $n+1$. L'opérateur $c_n^\dagger c_{n+1}$, au contraire, décrira le saut de l'électron du site $n+1$ vers le site n.

Pour compléter l'expression de l'hamiltonien électronique, il faut faire précéder ces opérateurs d'un coefficient $t_{n+1,n}$ déterminant la probabilité de saut (appelé aussi intégrale de saut car il dépend du recouvrement des fonctions d'ondes électroniques sur les sites n et $n+1$). Le *couplage* entre les

mouvements atomiques et les mouvements électroniques est obtenu en écrivant que $t_{n+1,n}$ dépend de la distance entre les atomes *via*

$$t_{n+1,n} = -[t_0 - \alpha\,(U_{n+1} - U_n)] \quad , \tag{13.3}$$

où α est un paramètre positif. Le signe négatif de l'intégrale de saut traduit le fait que le système abaisse son énergie en délocalisant les électrons. Étant donné ce choix d'interaction, le coefficient de transfert dans le cas d'une liaison allongée de u par rapport à la longueur moyenne d'équilibre vaudra $t_0 - 2\alpha u$, alors qu'il sera de $t_0 + 2\alpha u$ dans le cas d'une liaison raccourcie de u ; cela traduit donc bien que la probabilité de sauter augmentée dans le cas des liaisons les plus courtes. L'hamiltonien des électrons π s'écrit par conséquent :

$$H_\pi = -\sum_n [t_0 - \alpha\,(U_{n+1} - U_n)] \left(c^\dagger_{n+1} c_n + c^\dagger_n c_{n+1}\right) \quad . \tag{13.4}$$

On notera que cet hamiltonien ne comporte par de terme proportionnel à $c^\dagger_n c_n$ qui représenterait l'énergie d'un électron au site n. L'addition de ce terme aurait pour seul effet de changer le niveau de référence par rapport auquel on mesure l'énergie électronique. Cette description des électrons que l'on qualifie généralement d'approximation de « liaison faible » (ou « tight-binding »), revient à décrire les électrons π sur chaque site, ainsi que leurs possibilités de transfert, à partir d'états électroniques localisés sur chacun des sites. Elle néglige notamment les interactions coulombiennes entre électrons π.

Les deux hamiltoniens H_σ et H_π ont été obtenus par linéarisation des comportements : la non-linéarité ne provient que du *couplage entre ces deux contributions à l'hamiltonien.* À partir des définitions des deux sections (13.2) et (13.4) de l'hamiltonien complet, faisant interagir les électrons et les atomes, il faut procéder à trois étapes de difficulté croissante : l'étude statique en l'absence de soliton puis, en sa présence, et enfin l'étude dynamique.

13.3 L'état fondamental du polyacétylène

D'après la structure chimique, quand on cherche l'état fondamental on s'attend, soit à une alternance de liaisons simples et doubles, soit à une alternance de liaisons longues et courtes pour la géométrie de la chaîne carbonée. On cherche donc la distorsion de réseau U_n sous la forme :

$$U_n = (-1)^n\, u \quad \text{où } u \text{ est indépendant de } n \quad . \tag{13.5}$$

Avec cette hypothèse, l'hamiltonien total s'écrit :

$$H = H_\sigma + H_\pi \tag{13.6}$$

$$= \sum_n \frac{P_n^2}{2m} + 2Ku^2 - [t_0 + \alpha(-1)^n 2u] \left(c^\dagger_{n+1} c_n + c^\dagger_n c_{n+1}\right) \quad . \tag{13.7}$$

De plus, l'état fondamental, c'est-à-dire celui dont l'énergie est la plus basse possible, est un état stationnaire dans lequel le réseau n'a pas d'énergie cinétique. Son hamiltonien est donc simplement

$$H = 2NKu^2 - \sum_n [t_0 + \alpha(-1)^n 2u] \left(c_{n+1}^\dagger c_n + c_n^\dagger c_{n+1}\right) \tag{13.8}$$

$$= 2NKu^2 + H_\pi \quad , \tag{13.9}$$

comprenant l'énergie de distorsion statique d'une chaîne de N groupements CH et l'énergie électronique H_π correspondante.

Le calcul de l'énergie électronique consiste à déterminer quelles sont les énergies des états stationnaires des électrons dans un réseau d'atomes, c'est-à-dire à chercher les valeurs propres de l'hamiltonien électronique. On sait que des atomes isolés ont des niveaux d'énergie discrets bien définis. Quand on les rassemble pour former un réseau, leurs interactions conduisent à une démultiplication de ces niveaux qui forment les *bandes d'énergie électronique* que l'on rencontre en théorie quantique des solides. À chaque bande correspond un ensemble d'états quantiques possibles qui sont repérés par un vecteur d'onde, qui dans le cas unidimensionnel, se réduit à un simple scalaire, k. L'état fondamental est obtenu quand les électrons occupent les niveaux les plus bas, en tenant compte de la règle d'exclusion de Pauli qui interdit à deux électrons d'être dans le même état quantique. Les niveaux sont donc remplis par ordre croissant, jusqu'au dernier niveau énergétique occupé, le niveau de Fermi, noté E_F.

Ce calcul habituel en théorie quantique des solides est généralement fait en considérant que le réseau atomique est fixé, de pas a. Si l'on tient compte d'une possibilité de distorsion conduisant à une dimérisation en une séquence de liaisons longues et courtes, la structure de bandes est modifiée et, au milieu de la bande des énergies permises du réseau simple, il apparaît une bande interdite, c'est-à-dire une interruption dans les valeurs permises pour l'énergie. Pour comprendre la physique du polyacétylène, il est essentiel de bien comprendre ce calcul des états électroniques permis. Nous allons donc d'abord faire un rappel de théorie des bandes en partant du cas le plus simple d'un réseau régulier de pas a et en introduisant progressivement les éléments qui sont caractéristiques du polyacétylène.

13.3.1 Rappel de théorie des bandes

Considérons l'hamiltonien d'un système unidimensionnel homogène

$$H_h = \sum_n E_0 c_n^\dagger c_n - t_0 \left(c_{n+1}^\dagger c_n + c_n^\dagger c_{n+1}\right) \quad , \tag{13.10}$$

dans lequel, pour bien voir toutes les contributions, nous avons explicitement inclus l'énergie E_0 d'un électron occupant le site n que nous n'avions pas introduite dans le modèle SSH du polyacétylène. Cet hamiltonien correspond à

l'hamiltonien H_π lorsque α est nul. Pour déterminer les états électroniques, il faut préciser les conditions aux limites utilisées. Nous allons choisir les conditions habituelles en physique des solides : on considère un réseau de N sites, avec des conditions aux limites périodiques.

a) Cas où $t_0 = 0$

Commençons par étudier le cas le plus simple possible, $t_0 = 0$, car il nous fournira des indications pour traiter ensuite le cas $t_0 \neq 0$. En l'absence de transfert entre les sites, l'hamiltonien se réduit à $H_0 = \sum_n E_0 c_n^\dagger c_n$, dont les états propres correspondent aux états localisés sur un seul site. On peut noter un état en indiquant le nombre d'électrons pour chacun des sites de la chaîne sous la forme $|00...010...0\rangle$, ou, si l'on ne considère que des états à un électron, en utilisant une notation abrégée $|n\rangle$ qui indique seulement le numéro n du site sur lequel se trouve l'électron. Les opérateurs création et annihilation agissent comme d'habitude sur un tel état de la manière suivante :

$$c_n|0...010...0\rangle = |0...000...0\rangle \qquad (13.11)$$

$$c_n^\dagger|0...000...0\rangle = |0...010...0\rangle \quad , \qquad (13.12)$$

de sorte que

$$c_n^\dagger c_n|0...010...0\rangle = |0...010...0\rangle \qquad i.e. \qquad c_n^\dagger c_n|n\rangle = |n\rangle \quad , \qquad (13.13)$$

alors que $c_p^\dagger c_p|n\rangle = 0$ pour tout entier p différent de n. On constate par conséquent que pour un état $|n\rangle$ quelconque, $H_0|n\rangle = E_0|n\rangle$. Les N états $|n\rangle$ sont des états propres de l'hamiltonien, formant une base d'un sous-espace propre associé à la valeur propre E_0, mais ils ne constituent pas une base de travail intéressante car *ils ne possèdent pas les symétries du système.*

Comme la chaîne est invariante par l'opérateur de symétrie $\mathcal{T}(a)$ correspondant à la translation d'un pas du réseau, H_h et $\mathcal{T}(a)$ commutent, ce qui implique qu'ils possèdent une base propre commune. Ceci est aussi vrai pour H_0 qui est un cas particulier de H_h. Or, l'état propre $|n\rangle$ de H_0 n'est pas un état propre de $\mathcal{T}(a)$: l'opérateur translation déplaçant l'électron du site n au site $n+1$, on a l'égalité $\mathcal{T}(a)|n\rangle = |n+1\rangle$. On peut cependant construire un état propre de l'opérateur translation en combinant les différents états $|n\rangle$ de la façon suivante :

$$|\chi_k\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{p=1}^{N} e^{ikpa}\, |p\rangle \quad . \qquad (13.14)$$

Dans le cas où N est impair, qui est plus commode pour les calculs, l'indice k prend les N valeurs $[0, \pm 1, \pm 2, ..., \pm(N-1)/2] \times 2\pi/(Na)$, symétriques par rapport à 0. Les kets $|\chi_k\rangle$ apparaissent comme une transformée de Fourier discrète de l'ensemble des kets $|n\rangle$.

En utilisant les conditions aux limites, on vérifie que $|\chi_k\rangle$ est bien ket propre de $\mathcal{T}(a)$:

$$\mathcal{T}(a)|\chi_k\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{p=1}^{N} e^{ikpa}\ |p\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{p=1}^{N} e^{ikpa}\ |p+1\rangle \tag{13.15}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{p'=2}^{N+1} e^{ik(p'-1)a}\ |p'\rangle = e^{-ika}|\chi_k\rangle \quad . \tag{13.16}$$

En outre, comme $|\chi_k\rangle$ est une combinaison linéaire d'états propres de H_0 correspondant tous à la même valeur propre E_0, c'est également un état propre de H_0 pour cette valeur propre :

$$H_0\ |\chi_k\rangle = \sum_n E_0 c_n^\dagger c_n \left(\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{p=1}^{N} e^{ikpa}\ |p\rangle\right) \tag{13.17}$$

$$= E_0\ \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{p=1}^{N} e^{ikpa}\ \sum_n c_n^\dagger c_n|p\rangle = E_0\ \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{p=1}^{N} e^{ikpa}\ \underbrace{\sum_n \delta_{np}|p\rangle}_{|p\rangle}$$

$$= E_0\ |\chi_k\rangle \quad . \tag{13.18}$$

Nous avons ainsi construit un ensemble d'états propres, $\{|\chi_k\rangle\}$, de l'hamiltonien H_0, obéissant à la condition de symétrie de translation du système, qui sera utile pour étudier le cas où $t_0 \neq 0$.

b) Cas où $t_0 \neq 0$

En revenant désormais à l'hamiltonien (13.10), on note immédiatement que les états propres $|n\rangle$ de H_0 ne sont plus des états propres de H_h. Cependant, comme cet hamiltonien est toujours invariant par la translation $\mathcal{T}(a)$, H_h et $\mathcal{T}(a)$ doivent avoir une base propre commune. Elle est constituée à nouveau des états $|\chi_k\rangle$ construits précédemment comme nous allons le vérifier en calculant l'action de H_h sur l'état $|\chi_k\rangle$ de manière à déterminer l'énergie $E(k)$ de cet état propre.

Le premier terme de H_h étant H_0, on a simplement

$$\sum_n E_0 c_n^\dagger c_n \left(\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{p=1}^{N} e^{ikpa}\ |p\rangle\right) = E_0\ |\chi_k\rangle \quad , \tag{13.19}$$

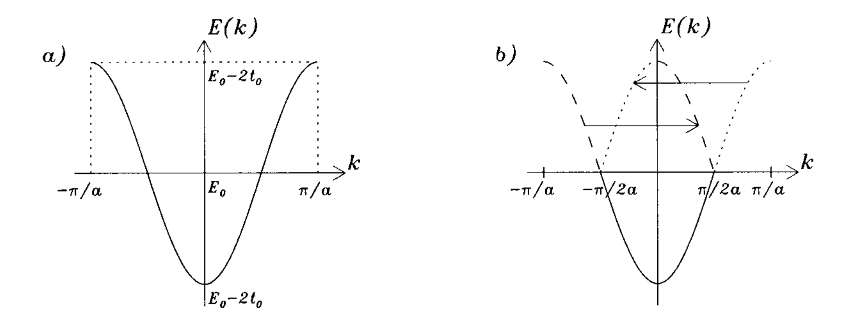


FIG. 13.4 – Représentation de la structure de bande d'énergie dans le cas d'un réseau de période a (a). En supposant que la chaîne est un système de période $2a$, on aboutit au schéma de la zone de Brillouin réduite (b). Les flèches mettent en évidence les branches qui ont été déplacées lors du repliement de la zone de Brillouin.

alors que les deux autres termes de H_h conduisent à :

$$\sum_n c_{n+1}^\dagger c_n \;|\chi_k\rangle = \sum_n c_{n+1}^\dagger c_n \left(\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{p=1}^{N} e^{ikpa} \;|p\rangle \right) \tag{13.20}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{p=1}^{N} e^{ikpa} |p+1\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{p'=1}^{N} e^{ik(p'-1)a} \;|p'\rangle \tag{13.21}$$

$$= e^{-ika} \;|\chi_k\rangle \tag{13.22}$$

et

$$\sum_n c_n^\dagger c_{n+1} \;|\chi_k\rangle = e^{ika} \;|\chi_k\rangle \quad . \tag{13.23}$$

En regroupant ces trois résultats, on aboutit à l'expression :

$$H_h \;|\chi_k\rangle = E_0 \;|\chi_k\rangle - t_0 \left(e^{-ika} + e^{ika}\right) |\chi_k\rangle \tag{13.24}$$

$$= [E_0 - 2t_0 \cos ka] \,|\chi_k\rangle = E(k) \,|\chi_k\rangle \quad . \tag{13.25}$$

Par conséquent, lorsque l'indice k varie à l'intérieur du domaine $[-\pi/a, \pi/a]$ qui constitue ce que l'on appelle la *zone de Brillouin* du réseau unidimensionnel de pas a, l'énergie $E(k)$ prend des valeurs dans l'intervalle $[E_0 - 2t_0, E_0 + 2t_0]$ (cf. fig. 13.4). Lorsque N devient très grand, l'ensemble des états permis tend à former un continuum constituant la bande des énergies permises. En outre, le calcul précédent montre que le terme $E_0 c_n^\dagger c_n$ dans l'hamiltonien, n'introduit qu'une translation des niveaux d'énergie. On peut donc choisir E_0 comme origine des énergies sans perte de généralité. C'est ce qui a été fait dans l'hamiltonien de SSH.

c) Le repliement de la zone de Brillouin

Avant de considérer le cas du polyacétylène qui, comme nous l'avons vu, à tendance à se dimériser en un réseau dont la maille élémentaire comporte deux groupements CH, il est utile de regarder la chaîne précédente homogène ($t_{n,n+1} = t_0$) comme un système de période $2a$. Le doublement de la maille correspond à une division par 2 des valeurs de k définissant les limites de la zone de Brillouin mais, bien entendu, puisque le système physique n'a pas été modifié, on doit retrouver dans cette nouvelle description les mêmes valeurs possibles pour l'énergie qu'auparavant. Pour cela il faut « replier » la structure de bande sur l'intervalle $[-\pi/(2a), \pi/(2a)]$ dans un schéma dit de « zone de Brillouin réduite ».

En prenant dorénavant $E_0 = 0$, l'expression de l'énergie électronique est

$$E(k) = -2t_0 \cos ka \quad . \tag{13.26}$$

Il est immédiat de vérifier que si l'on considère l'intervalle $[\pi/(2a), \pi/a]$ pour k, la transformation $k' = k - \pi/a$ et $E_{k'} = -E_k$ ramène dans le domaine $[-\pi/(2a), \pi/(2a)]$ la portion de la courbe $E(k)$ qui était dans cet intervalle quand on considérait un réseau de pas a, sans changer les valeurs de E. On peut de même replier dans la zone de Brillouin réduite l'intervalle $[-\pi/a, -\pi/(2a)]$ (cf. fig. 13.4(b)).

Cette transformation remplace l'équation unique (13.26) par les *deux* branches

$$E_k^v = -2t_0 \cos ka \tag{13.27}$$

$$E_k^c = 2t_0 \cos ka \quad , \tag{13.28}$$

en se limitant à la zone de Brillouin réduite $[-\pi/(2a), \pi/(2a)]$ (cf. fig. 13.4(b)). Les exposants v et c font référence aux bandes de valence et de conduction du matériau qui sont définies dans la figure 13.5.

Pour compléter le passage à la zone de Brillouin réduite, on introduit les kets propres associés aux deux branches.

$$|\chi_k^v\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{p=1}^{N} e^{ikpa} \; |p\rangle \quad , \tag{13.29}$$

$$|\chi_k^c\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{p=1}^{N} e^{ikpa} (-1)^p \; |p\rangle \quad . \tag{13.30}$$

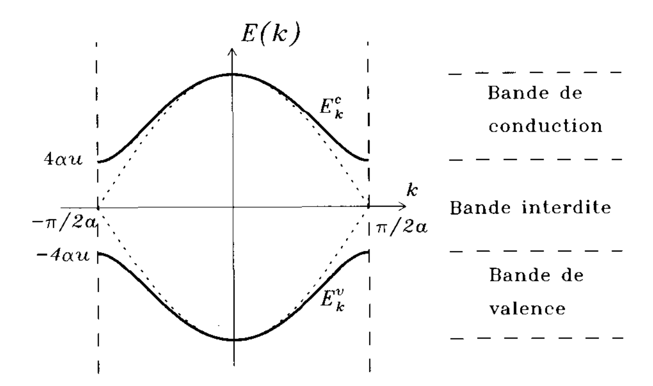


FIG. 13.5 – Apparition de la bande interdite en présence d'une distorsion. La courbe en pointillés correspond à la structure de bande (13.27) et (13.28) dans le cadre de l'hamiltonien homogène H_h, dans la zone de Brillouin réduite. Celle en traits pleins correspond à la formule (13.36) de l'hamiltonien H_π.

On peut alors vérifier que ce sont des états propres du Hamiltonien H_h pour les valeurs propres E_k^v et E_k^c. En effet,

$$H_h\;|\chi_k^c\rangle = -t_0 \sum_n \left(c_{n+1}^\dagger c_n + c_n^\dagger c_{n+1}\right)\left(\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_p e^{ikpa}(-1)^p\;|p\rangle\right) \tag{13.31}$$

$$= -\frac{t_0}{\sqrt{N}}\sum_n \left(e^{ikna}(-1)^n\;|n+1\rangle + e^{ik(n+1)a}(-1)^{n+1}\;|n\rangle\right) \tag{13.32}$$

$$= -\frac{t_0}{\sqrt{N}}\left(\sum_{n'} e^{ik(n'-1)a}(-1)^{n'-1}\;|n'\rangle + \sum_n e^{ik(n+1)a}(-1)^{n+1}\;|n\rangle\right)$$

$$= -\frac{t_0}{\sqrt{N}}\left(-e^{-ika}\sum_{n'} e^{ikn'a}(-1)^{n'}\;|n'\rangle - e^{ika}\sum_n e^{ikna}(-1)^n\;|n\rangle\right)$$

$$= -\frac{t_0}{\sqrt{N}}\,(-2\cos ka)\sum_n e^{ikna}(-1)^n\;|n\rangle \tag{13.33}$$

$$= 2t_0\cos ka\;|\chi_k^c\rangle = E_k^c\;|\chi_k^c\rangle \quad . \tag{13.34}$$

On obtient de manière similaire que

$$H_h\;|\chi_k^v\rangle = -2t_0\cos ka\;|\chi_k^v\rangle = E_k^v|\chi_k^v\rangle \quad . \tag{13.35}$$

13.3.2 La structure de bandes du polyacétylène

Revenons maintenant à l'hamiltonien H_π lorsque α n'est pas nul. On se *fixe* une valeur de u et il faut déterminer la structure de bandes lorsque, au lieu d'une seule valeur de t_0, on a deux valeurs alternées $t_0 \pm 2\alpha u$. Le calcul

est plus compliqué [142] mais les résultats correspondent simplement à une déformation des deux branches obtenues pour $\alpha = 0$. La formule (13.27) se transforme en

$$E_k^v = -\sqrt{4t_0^2 \cos^2 ka + 16\alpha^2 u^2 \sin^2 ka} \quad , \tag{13.36}$$

et on obtient la seconde branche par $E_k^c = -E_k^v$. L'existence des deux valeurs différentes pour l'intégrale de transfert lève la dégénérescence sur les bords de la zone de Brillouin (cf. fig. 13.5). La bande d'énergie qui s'étendait de $-2t_0$ à $2t_0$ se partage en deux bandes, séparées par une bande interdite de largeur $8\alpha u$. Les bandes inférieure et supérieure sont appelées respectivement *bande de valence et bande de conduction.*

Nous considérons une chaîne de N groupements CH, soit $N/2$ mailles de période $2a$, de sorte que la courbe relative à chaque bande d'énergie correspond à $N/2$ valeurs de l'indice k. Une telle chaîne comporte N électrons π que l'on doit placer sur les niveaux d'énergie que l'on a obtenus. Or chacun des états propres $|\chi_k\rangle$ correspond à 2 états quantiques car il faut tenir compte de deux valeurs possibles pour le spin de l'électron. En plaçant les électrons sur des niveaux d'énergie croissants tout en tenant compte de la règle d'exclusion de Pauli, on remplit donc exactement la bande de valence. Par abus de langage et en référence au cas de la bande unique obtenue en l'absence de dimérisation, on dit parfois que le polyacétylène est un système à bande à demi-pleine.

Cela permet de comprendre pourquoi le polyacétylène à tendance à se dimériser en formant une alternance de liaisons simples et doubles. En effet, comme la largeur de bande interdite est proportionnelle à la distorsion u, lorsque cette dernière augmente, l'énergie des états de la bande de valence, et tout particulièrement ceux des bords de zone, s'abaisse. La baisse de ces niveaux d'énergie est exactement compensée par une hausse équivalente des énergies de la bande de conduction mais, dans le cas présent où la bande de conduction n'est pas occupée, cette hausse est sans incidence sur l'énergie du système. Lorsque seule la bande de valence est pleine, le réseau a ainsi « intérêt » à se distordre pour gagner de l'énergie électronique. Ce phénomène général est connu sous le nom de distorsion de Peierls. Pour le polyacétylène, il explique l'alternance entre liaison courte et liaison longue, et il montre en outre que le polyacétylène est un isolant dans son état fondamental puisque sa bande de valence est pleine.

Le gain d'énergie électronique obtenu par distorsion du réseau ne doit cependant pas faire oublier que l'énergie totale du polyacétylène comporte aussi la contribution de l'hamiltonien H_σ. La distorsion du réseau induit un coût énergétique au niveau des liaisons σ qui lient les atomes de carbone, conformément à l'équation (13.9). Le système trouve son état d'équilibre pour une valeur non nulle de la distorsion, pour laquelle le gain d'énergie électronique est compensé par le coût énergétique de la distorsion. Cet état est l'état dimérisé. On retrouve ici un cas particulier du théorème de Peierls [122] qui

dit qu'un métal à une dimension serait instable vis-à-vis d'une distorsion de réseau créant une dimérisation générant une bande interdite au-dessus du dernier niveau occupé, ce qui rendrait le matériau isolant. Ce théorème interdit la conduction de type métallique dans un système unidimensionnel.

L'énergie de l'état fondamental $E_0(u)$ du polyacétylène, obtenue en sommant les énergies E_k^v de la bande de valence (chaque état étant occupé par deux électrons) et l'énergie de distorsion des liaisons σ, vaut :

$$E_0(u) = 2KNu^2 + 2\sum_k E_k^v \tag{13.37}$$

$$= 2KNu^2 - 2\sum_k \sqrt{4t_0^2\cos^2 ka + 16\alpha^2u^2\sin^2 ka} \quad . \tag{13.38}$$

En considérant que le nombre d'atomes est très grand, on remplace la somme par une intégrale en tenant compte du fait que deux termes dans la somme correspondent à des valeurs de k qui diffèrent de $2\pi/(Na)$ ($N/2$ valeurs entre $-\pi/(2a)$ et $\pi/(2a)$), ce qui donne :

$$E_0(u) = 2KNu^2 - 2\int_{-\pi/2a}^{\pi/2a} \mathrm{d}k \frac{Na}{2\pi}\sqrt{4t_0^2\cos^2 ka + 16\alpha^2u^2\sin^2 ka} \quad . \tag{13.39}$$

En introduisant le variable $z = 2\alpha u/t_0$ et l'intégrale elliptique

$$E_\ell(m) = \int_0^{\pi/2} \mathrm{d}\theta\left(1 - m\sin^2\theta\right)^{1/2} \quad , \tag{13.40}$$

on peut réécrire l'équation (13.39) sous la forme plus compacte :

$$E_0(u) = N\left(\frac{Kt_0^2}{2\alpha^2}z^2 - \frac{4t_0}{\pi}E_\ell\left(1 - z^2\right)\right) \quad . \tag{13.41}$$

En utilisant le développement limité de la fonction elliptique $E_\ell(1 - z^2)$ au voisinage de $z = 0$, on obtient l'expression plus explicite suivante :

$$E_0(u) \simeq N\left(\frac{Kt_0^2}{2\alpha^2}z^2 - \frac{4t_0}{\pi}\left[1 + \frac{1}{2}\left(\ln\frac{4}{z} - \frac{1}{2}\right)z^2 + \mathcal{O}\left(z^4\right)\right]\right) \quad . \tag{13.42}$$

La figure 13.6 révèle que cet état fondamental possède deux *minima* pour $u = \pm u_0$. On trouve, par un calcul non perturbatif, que le polyacétylène doit être dimérisé puisque l'état homogène $z = 0$ est instable. Comme la distorsion par rapport à la chaîne régulière de pas a est $U_n = (-1)^n u$ d'après l'équation (13.5), les *minima* en deux valeurs opposées pour u diffèrent par un échange entre les liaisons longues et courtes. Ils représentent les deux types de conformation trans de la chaîne que nous avions notés A et B sur la figure 13.1.

Il est intéressant de donner quelques valeurs numériques pour le polyacétylène. En prenant le choix proposé par SSH [142], $\alpha = 4{,}1$ eV/Å, $K = 21$ eV/Å^2

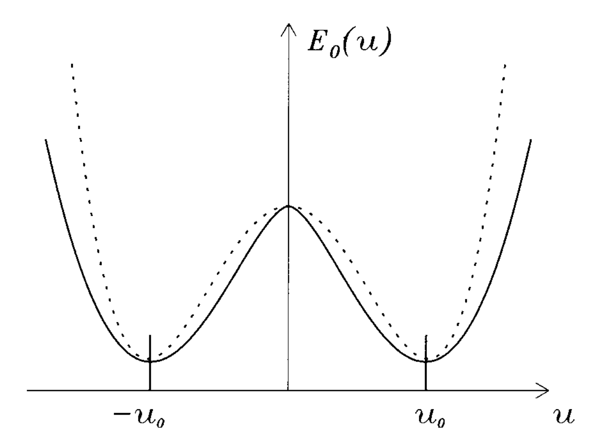


FIG. 13.6 – La ligne continue représente l'énergie E_0 du polyacétylène en fonction de la distorsion u donnant le déplacement des groupements CH par rapport à la structure régulière de référence. La ligne en pointillés représente le potentiel (13.44) qui permet un traitement analytique du défaut entre les deux états fondamentaux du polyacétylène.

et $t_0 = 2{,}5$ eV, on obtient comme valeur de distorsion $u_0 \simeq 0{,}04$ Å, qui conduit à une variation de la longueur de liaison $\pm\sqrt{3}u_0 = 0{,}073$ Å en tenant compte de l'inclinaison des liaisons qui sont à 60° par rapport à l'axe de la chaîne, le long duquel u est mesuré. La largeur de la bande interdite, qui vaut 1,3 eV, est très supérieure à l'énergie des fluctuations thermiques qui est de l'ordre de 0,025 eV à température ambiante. Elle est beaucoup trop élevée pour permettre l'excitation thermique de porteurs dans la bande de conduction et c'est pourquoi le polyacétylène dans son état fondamental est isolant.

13.4 L'état excité du polyacétylène : la solution soliton

13.4.1 La méthode

L'étude du fondamental ayant révélé la présence de deux *minima* dégénérés, on peut prévoir l'existence d'excitations de type soliton topologique interpolant ces deux états fondamentaux. Il est possible de déterminer la structure de l'interface et son effet sur les états électroniques, en procédant selon la démarche proposée par SSH [142]. On considère un système dans l'état A à gauche et dans l'état B à droite. On suppose que la région intermédiaire, que l'on appellera interface et dont on souhaite déterminer la structure, concerne une cinquantaine de mailles. On décompose l'hamiltonien sous la forme $H = H_1 + V$ où H_1 correspond aux domaines A et B dans

l'état fondamental du système homogène, alors que V correspond à une perturbation étendue dont on précise la nature en supposant qu'au niveau de l'interface u_n, défini par $U_n = (-1)^n u_n$, varie selon la forme :

$$u_n = -u_0 \tanh \frac{n}{\ell} \quad . \tag{13.43}$$

Cette hypothèse détermine $t_{n+1,n}$ dans la zone d'interface de sorte que le problème quantique pour les régions A, B et l'interface est complètement défini. L'état fondamental du système quantique avec ces conditions aux limites peut alors être obtenu en faisant partiellement appel à des calculs numériques. La dernière étape est d'utiliser une méthode variationnelle pour chercher la valeur de ℓ pour laquelle ce système a l'énergie la plus basse. Le calcul donne une largeur ℓ d'environ 7 mailles et une énergie du soliton $E_{sol} \simeq 0{,}42$ eV.

Il est cependant possible de faire une étude analytique permettant d'interpréter divers résultats expérimentaux en admettant que l'expression de l'énergie $E_0(u)$ que nous venons d'établir pour la chaîne de polyacétylène est *valable même au cœur de l'interface.* C'est évidemment une approximation car, bien que le résultat ait été établi pour n'importe quelle valeur de la distorsion u, y compris les valeurs différentes de $\pm u_0$ qui ne minimisent pas l'énergie, le calcul supposait *a priori* que la distorsion u était *la même en tout point de la chaîne.* L'approximation que nous allons utiliser est, par conséquent, d'autant mieux justifiée que la variable u_n varie peu d'un site à son voisin. Cette approximation, similaire à l'approximation des milieux continus sera donc acceptable si l'on peut vérifier *a posteriori* que le soliton est large.

La figure 13.6 montre que si l'on ajuste la hauteur de la barrière de potentiel séparant les deux puits en choisissant une valeur de V_0 égale à l'énergie de barrière, la fonction

$$V(u) = V_0 \left(1 - \frac{u^2}{u_0^2}\right)^2 \tag{13.44}$$

donne une approximation satisfaisante de la fonction $E_0(u)$ dans l'intervalle $[-u_0, u_0]$ qui est le domaine de variation de u dans l'interface.

En retranchant l'énergie des liaisons σ, on obtient une expression de l'énergie par site associée aux électrons π :

$$E_\pi(u) = E_0(u) - 2Ku^2 = V_0 \left(1 - \frac{u^2}{u_0^2}\right)^2 - 2Ku^2 \quad . \tag{13.45}$$

Dans le même esprit que le calcul réalisé par SSH, nous admettrons que l'on peut utiliser cette expression *déduite d'un calcul fait pour une chaîne homogène* pour obtenir un hamiltonien approché *pour une chaîne qui n'est plus dans l'état fondamental homogène.* Pour cela on suppose que l'expression (13.45) de $E_\pi(u)$ reste valable localement même dans un système où la distorsion u_n est non homogène et on lui ajoute l'énergie cinétique des groupements CH et

l'énergie de couplage entre groupements consécutifs provenant des liaisons σ. On obtient l'hamiltonien :

$$H = \sum_n \frac{1}{2} m \left(\frac{\mathrm{d}u_n}{\mathrm{d}t} \right)^2 + \frac{1}{2} K \left(u_n + u_{n+1} \right)^2 + \left[V_0 \left(1 - \frac{u_n^2}{u_0^2} \right)^2 - 2K u_n^2 \right] . \tag{13.46}$$

On notera le signe + qui apparaît dans le terme de couplage $(1/2)K(u_n + u_{n+1})^2$ qui provient de la transformation $U_n = (-1)^n u_n$.

L'intérêt de cette formule est qu'elle fournit une expression de l'énergie qui est exprimée uniquement en fonction des variables classiques du modèle, les variables u_n de position des groupements CH. Les effets quantiques n'ont pas été ignorés puisqu'ils ont été pris en compte dans le calcul de $E_0(u)$ dont nous avons tiré la valeur de l'énergie associée aux électrons π sur chaque site.

13.4.2 La solution soliton

Posons $\phi = u/u_0$ et passons aux variables temporelle et spatiale sans dimension $\tau = \omega_0 t$ et $\xi = sx$, en introduisant les quantités $\omega_0^2 = 4V_0/(mu_0^2)$ et $s = 4V_0/(Ku_0^2 a^2)$. En faisant, en outre, l'approximation des milieux continus, on peut mettre l'hamiltonien (13.46) sous la forme

$$H = A \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}\xi \left[\frac{1}{2} \left(\frac{\partial \phi}{\partial \tau} \right)^2 + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \phi}{\partial \xi} \right)^2 + B\phi \frac{\partial \phi}{\partial \xi} + \frac{1}{4} \left(1 - \phi^2 \right)^2 \right] , \tag{13.47}$$

$$= A \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}\xi \, \mathcal{H} \quad , \tag{13.48}$$

où $A = 2\sqrt{V_0 K u_0^2}$ et $B = \sqrt{K u_0^2 / V_0}$ sont deux constantes. On note immédiatement que le terme $B\phi\phi_\xi$ peut se réécrire sous la forme d'une dérivée spatiale exacte, $B\left(\phi^2\right)_\xi/2$. Son intégration spatiale donne une valeur qui ne dépend que des conditions aux limites à l'infini sur ϕ. Nous cherchons des solutions pour lesquelles, aux deux extrémités de la chaîne, le système est dans son état fondamental $\phi = \pm 1$. Le terme $B\phi\phi_\xi$ peut alors être ignoré car sa contribution à l'énergie est nulle. Nous travaillerons donc avec la densité hamiltonienne :

$$\mathcal{H}' = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \phi}{\partial \tau} \right)^2 + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \phi}{\partial \xi} \right)^2 + \frac{1}{4} \left(1 - \phi^2 \right)^2 \quad . \tag{13.49}$$

En notant Π, le moment conjugué de la variable ϕ, il est possible d'écrire l'équation aux dérivées partielles en ϕ qui résulte de cet hamiltonien. Les équations d'Hamilton des milieux continus donnent :

$$\frac{\partial \phi}{\partial \tau} = \frac{\partial \mathcal{H}'}{\partial \Pi} = \Pi \tag{13.50}$$

$$\frac{\partial \Pi}{\partial \tau} = -\frac{\partial \mathcal{H}'}{\partial \phi} + \frac{\partial}{\partial \xi} \frac{\partial \mathcal{H}'}{\partial \phi_\xi} = \phi(1 - \phi^2) + \frac{\partial^2 \phi}{\partial \xi^2} \quad . \tag{13.51}$$

En les combinant, on aboutit à l'équation

$$\frac{\partial^2\phi}{\partial\tau^2} - \frac{\partial^2\phi}{\partial\xi^2} - \phi(1-\phi^2) = 0 \quad , \tag{13.52}$$

qui est l'équation d'évolution du modèle ϕ^4 introduit à la section 2.4. Sa solution à profil constant est :

$$\phi(\xi,\tau) = \pm\tanh\frac{\xi - v\tau}{\sqrt{2(1-v^2)}} \quad . \tag{13.53}$$

Avec les paramètres $u_0 = 0{,}04$ Å, $K = 920$ eV/Å^2, $V_0 = 0{,}015$ eV, $m = 13 \times 1{,}67 \cdot 10^{-27}$ kg, on obtient une largeur, pour un soliton statique, $\sqrt{2}/s$, de l'ordre de 7 mailles, qui correspond à ce que donne le calcul numérique fait par SSH. Pour cette largeur, l'approximation des milieux continus est acceptable. Il faut cependant noter que ce résultat a été obtenu en prenant une constante de couplage beaucoup plus importante que celle utilisée dans la résolution numérique de SSH (21 eV/Å^2) qui aurait conduit, dans le cadre du modèle que nous avons présenté, à une interface large seulement d'une maille. Ce modèle, qui a l'intérêt de permettre des calculs analytiques, demande donc l'ajustement d'un paramètre pour donner des résultats acceptables.

En introduisant la solution (13.53) dans l'hamiltonien (13.48) avec la densité hamiltonienne (13.49), on peut calculer l'énergie du soliton statique :

$$E_{sol} = A\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}\xi \left[\frac{1}{2}\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\,\mathrm{sech}^2\frac{\xi}{\sqrt{2}}\right)^2 + \frac{1}{4}\left(1-\tanh^2\frac{\xi}{\sqrt{2}}\right)^2\right] \tag{13.54}$$

$$= A\int_{-\infty}^{+\infty} \sqrt{2}\,\mathrm{d}X \left[\frac{1}{4}\,\mathrm{sech}^4 X + \frac{1}{4}\left(1-\tanh^2 X\right)^2\right] \tag{13.55}$$

$$= \frac{A}{\sqrt{2}}\underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}X\ \mathrm{sech}^4 X}_{4/3} = \frac{2\sqrt{2}}{3}A \quad . \tag{13.56}$$

En utilisant les valeurs numériques indiquées ci-dessus, on obtient $A = 0{,}29$ eV et une énergie du soliton $E_{sol} = 0{,}28$ eV qui est du même ordre que l'énergie de 0,42 eV obtenue par le calcul de SSH.

Si l'on traite le soliton comme une quasi-particule libre de masse M se déplaçant dans un milieu de vitesse du son $c_0^2 = Ka^2/m$, son énergie au repos $Mc_0^2 = 0{,}28$ eV est très supérieure à l'énergie thermique, qui est de l'ordre de $k_BT \simeq 0{,}025$ eV à température ambiante. Les solitons ne peuvent donc pas être créés thermiquement. En revanche, s'ils sont présents dans le réseau, les fluctuations thermiques sont susceptibles de leur donner une énergie cinétique. Par un raisonnement très simple, il est possible d'obtenir une *estimation* de la vitesse quadratique moyenne des solitons à la température ambiante. Si l'on considère que leur énergie thermique est faible devant leur énergie au repos,

on peut utiliser l'expression non relativiste $Mv^2/2$ pour leur énergie cinétique. On obtient ainsi :

$$\frac{v^2}{c_0^2} \simeq \frac{k_B T}{E_{sol}} = \frac{0{,}025}{0{,}28} \qquad \text{soit} \qquad v \simeq 0{,}3\ c_0 \quad . \tag{13.57}$$

Avec les valeurs numériques précédemment utilisées, on aboutit à $c_0 \simeq 10^5$ m/s. On obtient par conséquent une estimation de la vitesse thermique des solitons de $3 \cdot 10^4$ m/s. Cette valeur très grande provient, d'une part, de la valeur élevée de K que nous avons dû introduire pour obtenir une largeur convenable pour le soliton dans notre modèle analytique simplifié, mais elle est surtout liée à la masse effective très faible des porteurs. On trouve en effet $M = E_{sol}/c_0^2 \simeq 4{,}6 \cdot 10^{-30}$ kg, c'est-à-dire environ 5 masses électroniques (le calcul quantique de SSH donne 6 masses électroniques). Le soliton est donc bien un objet quantique. Cette très faible valeur de la masse effective est une conséquence logique de la très faible valeur de la distorsion u_0 par rapport au pas du réseau du polyacétylène. La vitesse des porteurs est en réalité beaucoup plus faible que ne le laisse supposer ce calcul grossier, à cause des effets de discrétisation qui, bien que faibles, ne sont pas tout à fait négligeables, mais surtout parce que les porteurs ne sont pas libres, mais diffusés par les phonons et les impuretés, comme les centres donneurs.

13.5 Le mécanisme de la conduction électrique des polyacétylènes conducteurs

13.5.1 Le principe

L'étude réalisée par SSH et le modèle que nous venons de présenter montrent que le polyacétylène peut avoir des états excités, approximativement décrits par des solitons topologiques d'une largeur de 7 mailles. Cette largeur nettement supérieure au pas de réseau justifie l'utilisation de l'expression de $E_0(u)$ déduite du calcul sur un système homogène pour déduire l'énergie des électrons π dans le modèle. De plus, pour une largeur de 7 mailles, les effets de discrétisation sont assez faibles pour que les solitons soient très mobiles.

Les solitons seraient donc d'excellents candidats pour jouer le rôle de porteurs de charge et expliquer la conductivité électrique du polyacétylène... s'ils étaient chargés. Ce n'est pas le cas, comme le montre la figure 13.2 : chaque double liaison correspond à la mise en commun de deux électrons π fournis par les deux carbones voisins ; lorsqu'il y a rupture de l'alternance entre simples et doubles liaisons, le carbone situé au niveau du défaut garde son électron π qui n'est pas engagé dans une double liaison et l'ensemble reste neutre.

Cependant la résolution du problème quantique par SSH montre que les états accessibles pour les électrons sont modifiés par la présence du soliton. La distorsion du réseau CH est accompagnée de l'apparition d'un état d'énergie électronique localisé spatialement autour du soliton (contrairement aux autres

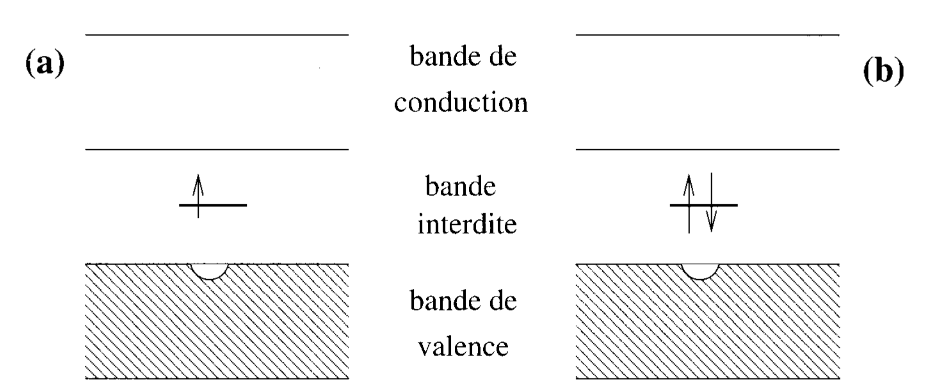


FIG. 13.7 – Structure de bandes d'énergie électronique pour un soliton neutre (a) et pour un soliton chargé par un électron fourni par un dopant donneur (b).

états de la bande qui sont délocalisés) et dont l'énergie correspond au *milieu de la bande interdite* (cf. fig. 13.7(a)). L'existence de cet état supplémentaire se traduit par une diminution de la densité d'états accessibles dans les bandes de valence et de conduction, notamment en bord de bande.

Ce niveau électronique supplémentaire associé au soliton est celui qu'occupe l'électron π isolé de la figure 13.2. Comme son spin n'est par apparié avec celui d'un autre électron, le soliton apparaît comme une *quasi-particule de charge nulle et de spin* $1/2$. L'existence de ce niveau est importante car il est possible de le détecter expérimentalement par photoexcitation ce qui apporte une preuve indirecte de l'existence du soliton.

Bien qu'il soit intrinsèquement non chargé, le soliton peut pourtant jouer un rôle dans la conductivité électrique du polyacétylène car l'état électronique localisé qui lui est associé peut être peuplé par un second électron si l'on dope le polyacétylène. Le principe du dopage consiste à introduire dans le matériau des donneurs d'électrons, notés D, qui s'intercalent entre les différentes chaînes de polymères. Ils perdent un électron qui vient préférentiellement se placer dans les états électroniques supplémentaires situés au milieu de la bande interdite (cf. fig. 13.7(b)), plutôt que dans les états de la bande de valence, énergétiquement défavorables. Les donneurs subsistent sous forme d'ions D^+, piégés dans la matrice.

Les solitons chargés correspondent à des *pseudo-particules de charge* $-e$ *et de spin* 0 puisque l'état de milieu de bande interdite est peuplé de deux électrons dont les spins sont appariés. En utilisant les modes collectifs que sont les solitons, il est ainsi possible de concevoir des « particules » dont le rapport charge-spin est non standard. Dans une chaîne carbonée, sans hydrogène, formée d'une alternance de simples et triples liaisons entre atomes de carbone, on peut même obtenir ainsi des pseudo-particules ayant une charge fractionnaire $-e/3$.

Avec des dopants appropriés [71], on peut faire passer le polyacétylène d'une situation où il est un très bon isolant à une situation où il a une conductivité de l'ordre du dixième de celle du cuivre.

Le soliton chargé n'est cependant pas totalement libre car il interagit avec l'ion D^+ issu du dopant situé à une distance notée d de la chaîne. Oscillant dans le potentiel attractif du dopant, il introduit dans le matériau un dipôle oscillant dont la fréquence d'oscillation se situe dans le domaine des ondes électromagnétiques infra-rouges. La spectroscopie infra-rouge a ainsi pu être utilisée pour étudier les propriétés des solitons (cf. fig. 13.8).

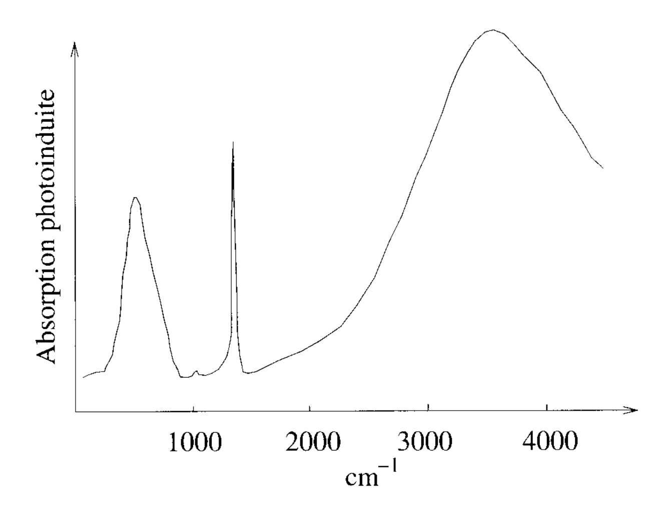


FIG. 13.8 – Spectre d'absorption du trans-$(CH)_x$ dans le domaine infra-rouge (d'après la référence [138]). La large bande d'absorption vers 3 560 cm^{-1} correspond à une transition électronique. Les autres bandes correspondent aux bandes de solitons. Le mode vers 500 cm^{-1} est le mode de translation tandis que le mode vers 1 300 cm^{-1} est le mode interne. Dans cette expérience, afin d'obtenir une densité suffisante de solitons pour faciliter leur détection, les solitons ont été créés par photo-excitation.

Il faut préciser que l'interface entre les deux formes du trans polyacétylène n'est pas exactement un soliton même si, en raison de sa nature de quasi-particule de sa facilité à se déplacer et de la description analytique que l'on peut en donner, elle s'apparente beaucoup à un soliton. Ces « solitons » ne sont pas préservés dans des collisions avec d'autres interfaces. Nous allons cependant voir que la description analytique utilisant le concept de soliton et les outils associés est utile pour comprendre des observations expérimentales qui ont permis de préciser la nature des porteurs de charge dans le polyacétylène.

13.5.2 La dynamique du soliton chargé

La densité de charge électronique $\rho(x)$ du soliton « dopé » est déterminée par la fonction d'onde $\phi_0(x)$ de l'état électronique localisé autour du soliton par

$$\rho(x) = -e|\phi_0(x)|^2 \quad . \tag{13.58}$$

La fonction $|\phi_0(x)|^2$, obtenue par les calculs de SSH, a l'aspect d'un pic centré sur la position du soliton, dont l'extension spatiale correspond à celle de la distorsion du réseau qui est décrite par la solution soliton $u(x) = u_0\,\phi(s\,x)$ où ϕ est donné par la formule (13.53). La dérivée de cette solution par rapport à x présente un maximum en $x = 0$ et vaut $u_x = s\,(u_0/\sqrt{2})\,\mathrm{sech}^2(s\,x/\sqrt{2})$. Elle a la même allure et la même extension spatiale que $|\phi_0(x)|^2$ et correspond même exactement avec l'expression analytique approchée de $|\phi_0(x)|^2$ obtenue par SSH [142]. On admettra donc que l'on peut décrire la densité de charge associée au soliton par l'expression :

$$\rho(x) = -\frac{e}{2}\frac{1}{u_0}\frac{\partial u}{\partial x} = -\frac{es}{2}\frac{\partial \phi}{\partial x} \quad . \tag{13.59}$$

En introduisant la permittivité diélectrique relative du polyacétylène $\varepsilon_r =$ 2,3, on peut évaluer l'énergie d'interaction coulombienne du soliton avec le donneur situé en $x = 0$ à la distance d de la chaîne de polyacétylène, sous la forme :

$$U = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e}{4\pi\varepsilon_0\varepsilon_r}\frac{\rho(x)}{\sqrt{d^2 + x^2}}\mathrm{d}x \quad . \tag{13.60}$$

Cette expression est manifestement dominée par la valeur en $x = 0$, notamment lorsque la distance d du donneur à la chaîne diminue. Pour simplifier le calcul, nous l'approcherons par

$$U' = \frac{e\rho(0)}{4\pi\varepsilon_0\varepsilon_r}\,\frac{a}{d} \tag{13.61}$$

c'est-à-dire

$$U' = \frac{e}{4\pi\varepsilon_0\varepsilon_r}\,\frac{a}{d}\,\frac{(-es)}{2}\phi_x(0) = -\frac{e^2 s}{8\pi\varepsilon_0\varepsilon_r}\,\frac{a}{d}\,\phi_x(0) \quad , \tag{13.62}$$

ce qui revient à admettre que l'interaction est déterminée par la portion de la charge du soliton qui se situe dans la maille de l'impureté.

On obtient ainsi une contribution d'énergie potentielle supplémentaire que l'on doit ajouter à l'hamiltonien de la chaîne de polyacétylène (13.48) si l'on veut étudier l'interaction soliton-impureté. Pour analyser la dynamique du soliton, on peut utiliser la méthode des coordonnées collectives en représentant la solution soliton par

$$\phi(\xi,\tau) = \tanh\left[\frac{\xi - X(\tau)}{\sqrt{2}}\right] \quad , \tag{13.63}$$

où $X(\tau)$ repère la coordonnée de position du soliton.

Pour cela on écrit le lagrangien qui se déduit de l'hamiltonien (13.46) avec la densité hamiltonienne (13.49) et en tenant compte du potentiel (13.61),

$$L = A \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi \left[\frac{1}{2} \left(\frac{\partial \phi}{\partial \tau} \right)^2 - \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \phi}{\partial \xi} \right)^2 - \frac{1}{4} \left(1 - \phi^2\right)^2 \right] + \frac{e^2 sa}{8\pi \varepsilon_0 \varepsilon_r d} \phi_x(0) \quad . \tag{13.64}$$

En y reportant l'expression (13.63) qui introduit la coordonnée collective, on obtient

$$L = A \left(\frac{1}{2} \frac{\dot{X}(\tau)^2}{\sqrt{2}} - \frac{1}{2\sqrt{2}} - \frac{\sqrt{2}}{4} \right) \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\xi}{\sqrt{2}} \operatorname{sech}^4 \left[\frac{\xi - X(\tau)}{\sqrt{2}} \right]}_{4/3} + \frac{e^2 sa}{8\sqrt{2}\pi \varepsilon_0 \varepsilon_r d} \operatorname{sech}^2 \frac{X(\tau)}{\sqrt{2}} \tag{13.65}$$

$$= \frac{1}{2} \left(\frac{2\sqrt{2}A}{3} \right) \dot{X}^2(\tau) - V_{\text{eff}}(X) \tag{13.66}$$

avec le potentiel effectif

$$V_{\text{eff}}(X) = \frac{4}{3\sqrt{2}} - C \operatorname{sech}^2 \frac{X(\tau)}{\sqrt{2}} \tag{13.67}$$

et la constante $C = e^2 sa/(8\sqrt{2}\pi\varepsilon_0\varepsilon_r d)$. La présence du donneur introduit donc un potentiel d'interaction $V_{\text{eff}}(X)$ attractif pour le soliton. On retrouve par ailleurs la masse $M = 2\sqrt{2}A/3$ du soliton que l'on avait obtenue à partir de l'énergie du soliton au repos (cf. (13.56)).

L'équation de Lagrange appliquée au lagrangien effectif (13.66) donne l'équation d'évolution temporelle pour $X(\tau)$:

$$\frac{d}{d\tau} \frac{\partial L}{\partial \dot{X}} - \frac{\partial L}{\partial X} = \left(\frac{2\sqrt{2}A}{3} \right) \ddot{X} + \frac{2}{\sqrt{2}} C \operatorname{sech}^2 \frac{X}{\sqrt{2}} \tanh \frac{X}{\sqrt{2}} = 0 \quad . \tag{13.68}$$

En linéarisant autour de la position d'équilibre du potentiel, on obtient l'équation

$$\left(\frac{2\sqrt{2}A}{3} \right) \ddot{X} + CX = 0 \quad , \tag{13.69}$$

qui permet de définir la fréquence d'oscillation du soliton dans le potentiel du donneur $\Omega_0^2 = 3C/2\sqrt{2}A$. En revenant aux variables dimensionnées, on obtient la fréquence d'oscillation

$$\Omega^2 = \Omega_0^2 \omega_0^2 = \frac{4V_0}{Mu_0^2} \frac{3e^2}{32\pi\varepsilon_0\varepsilon_r d} \frac{1}{Ku_0^2} \tag{13.70}$$

$$\simeq 0{,}122 \cdot 10^{15} \text{ Hz} \quad , \tag{13.71}$$

en prenant $d = 3$ Å qui est une valeur réaliste pour la distance entre un ion donneur et une chaîne de polyacétylène. Le nombre d'onde correspondant

$$\sigma = \frac{\Omega}{2\pi c} 100 = 651{,}5 \text{ cm}^{-1} \quad , \tag{13.72}$$

(où c est la vitesse de la lumière dans le vide) est en accord très raisonnable avec le résultat expérimental de la figure (13.8). Le mode de translation observé expérimentalement est large car la fréquence associée à chaque soliton dépend de la position, repérée par d, du dopant D^+ le plus proche. Tous les solitons ne résonnent pas à la même fréquence et la largeur du mode observé expérimentalement résulte de la superposition de toutes leurs fréquences d'oscillations dans le champ des impuretés.

13.6 Une vérification expérimentale de la présence des solitons

La résonance due à la translation du soliton que nous venons d'étudier n'est pas une démonstration indiscutable du transport de charge par des solitons car toute charge mobile en présence d'un ion D^+ aurait pu donner une réponse analogue. Le calcul de la fréquence d'oscillation n'est pas non plus une bonne indication car cette fréquence est très sensible aux propriétés spécifiques d'un échantillon, telles que les distances entre les ions D^+ et les chaînes $(CH)_x$. Des travaux ont donc été menés pour vérifier la combinaison charge–spin inhabituelle qui conduit à un soliton chargé ($Q = -e$, $S = 0$). Cependant un autre test très sensible de la validité du modèle de transport de charge par solitons dans le polyacétylène a été obtenu par l'étude du mode interne d'excitation des solitons.

13.6.1 Le mode d'oscillation de la pente du soliton

Nous avons vu dans le chapitre 5 que le soliton ϕ^4 possède un mode interne qui correspond à l'oscillation de sa pente. Sa fréquence peut être obtenue par linéarisation autour de la solution soliton mais, pour illustrer une autre approche, nous allons la chercher ici par la méthode des coordonnées collectives.

Comme il s'agit d'une propriété intrinsèque du soliton qui n'est pas liée à la présence de l'impureté, nous considérons le lagrangien en l'absence de défaut

$$L = A \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}\xi \left[\frac{1}{2} \left(\frac{\partial \phi}{\partial \tau} \right)^2 - \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \phi}{\partial \xi} \right)^2 - \frac{1}{4} \left(1 - \phi^2 \right)^2 \right] \quad , \tag{13.73}$$

et nous cherchons une solution soliton sous la forme :

$$\phi(\xi, \tau) = \tanh(\alpha(\tau)\ \xi) \quad . \tag{13.74}$$

Nous n'avons pas introduit de coordonnée de position du soliton puisque nous sommes seulement intéressés ici par son mode interne. La formule (13.74) correspond à un soliton qui ne se déplace pas mais dont la pente $1/\alpha(\tau)$ dépend du temps. En introduisant cette forme de solution dans le lagrangien, on obtient

$$L = A\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}\xi \left[\frac{1}{2}\dot{\alpha}^2\xi^2 \operatorname{sech}^4(\alpha\xi) - \frac{1}{2}\alpha^2 \operatorname{sech}^4(\alpha\xi) - \frac{1}{4}\operatorname{sech}^4(\alpha\xi)\right] \tag{13.75}$$

$$= A\left[\frac{1}{2}\frac{\dot{\alpha}^2}{\alpha^3}\underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}u\, u^2 \operatorname{sech}^4 u}_{\pi^2/9-2/3} - \frac{1}{2}\frac{\alpha^2}{\alpha}\underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}u \operatorname{sech}^4 u}_{4/3} - \frac{1}{4}\frac{1}{\alpha}\underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}u \operatorname{sech}^4 u}_{4/3}\right]$$

$$= A\left[\frac{\mu}{2}\frac{\dot{\alpha}^2}{\alpha^3} - \frac{1}{3\alpha}(2\alpha^2+1)\right] \quad , \tag{13.76}$$

en posant $\mu = \pi^2/9 - 2/3$. Cette expression va nous permettre de déterminer l'évolution de $\alpha(\tau)$ à partir de l'équation de Lagrange qui en résulte :

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\tau}\frac{\partial L}{\partial \dot{\alpha}} - \frac{\partial L}{\partial \alpha} = A\left[\mu\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\tau}\left(\frac{\dot{\alpha}}{\alpha^3}\right) + \frac{3\mu}{2}\frac{\dot{\alpha}^2}{\alpha^4} + \frac{1}{3}\left(2 - \frac{1}{\alpha^2}\right)\right] = 0 \tag{13.77}$$

i.e.
$$\mu\left(\frac{\ddot{\alpha}}{\alpha^3} - \frac{3\mu}{2}\frac{\dot{\alpha}^2}{\alpha^4}\right) + \frac{1}{3}\left(2 - \frac{1}{\alpha^2}\right) = 0 \quad . \tag{13.78}$$

La solution statique est obtenue lorsque $\left(2 - 1/\alpha^2\right) = 0$, c'est-à-dire pour $\alpha = 1/\sqrt{2}$. On retrouve donc bien la pente du soliton ϕ^4 de l'équation (13.53).

13.6.2 La solution linéarisée

Linéarisons l'équation d'évolution temporelle de $\alpha(\tau)$ autour de la valeur du soliton statique. En introduisant $\alpha = (1+\theta)/\sqrt{2}$, on obtient :

$$\mu\frac{\ddot{\theta}/\sqrt{2}}{\left[(1+\theta)/\sqrt{2}\right]^3} + \mathcal{O}(\dot{\theta}^2) + \frac{1}{3}\left(2 - \frac{1}{(1+\theta)^2/2}\right) = 0 \quad , \tag{13.79}$$

où $\mathcal{O}(\dot{\theta}^2)$ est un terme non-linéaire de l'ordre de $\dot{\theta}^2$. Les termes linéaires par rapport à la variable θ et ses dérivées donnent simplement

$$\ddot{\theta} + \frac{2}{3\mu}\theta = 0 \quad . \tag{13.80}$$

Cette équation de type oscillateur harmonique indique que le soliton possède un mode interne dans lequel la pente oscille à la pulsation Ω_i, définie par $\Omega_i^2 = 2/(3\mu) \simeq 1{,}55$. La valeur de Ω_i est très proche de la fréquence du mode interne du soliton ϕ^4 donnée par linéarisation, $\Omega_1 = \sqrt{3/2}$ en variables adimensionnées, ce qui montre que les deux méthodes, coordonnées collectives et linéarisation directe autour de la solution soliton sont en accord.

13.6.3 L'observation du mode interne du soliton

L'expression de la densité de charge du soliton $\rho(x) \propto \partial u/\partial x$, et la solution soliton (13.74) donnent une expression de $\rho(x)$ de la forme $\rho(x) \propto \alpha(\tau)\ \mathrm{sech}^2[\alpha(\tau)\, s\, x]$. Même lorsque la pente du soliton oscille, sa densité de charge reste toujours une fonction symétrique autour de son centre. L'oscillation de la pente ne conduit donc pas à l'apparition d'un moment dipolaire oscillant que l'on pourrait observer par spectroscopie infra-rouge. Le mode interne du soliton a pourtant pu être observé expérimentalement [138, 151] car un soliton *mobile* avec une oscillation interne possède une activité infra-rouge contenant une contribution spécifique du mode interne qui est responsable du pic situé à environ 1 300 cm^{-1} sur la figure 13.8.

La réponse infra-rouge due au mode interne provient du fait qu'il est couplé avec le mode de translation du soliton qui est directement actif en infrarouge puisqu'il correspond au mouvement d'une charge électrique qui, avec l'impureté D^+, forme un dipôle oscillant. Il est possible de comprendre de manière qualitative l'origine du couplage en examinant la dynamique du soliton dans le champ du potentiel du défaut. Lorsque le défaut se situe sur la droite (respectivement la gauche) du soliton, la partie droite (respectivement gauche) du soliton subit de la part du défaut une attraction plus forte. Ce phénomène d'attraction différente des deux côtés du soliton tend à modifier sa pente et induit un échange d'énergie entre le mode de translation et le mode interne du soliton. En excitant le déplacement de translation, on s'attend donc à observer également une réponse à la fréquence du mode interne. Comme l'expérience confirme ce phénomène et que le mode interne est une caractéristique intrinsèque du soliton que l'on n'aurait pas avec une charge électrique ordinaire, cette expérience *apporte une confirmation du rôle des solitons* dans le transport de charge électrique dans le polyacétylène conducteur. De plus, la fréquence du mode interne est une propriété du soliton qui ne dépend pas de sa distance au défaut. On peut donc s'attendre à ce qu'elle soit beaucoup mieux définie que la fréquence du mode de translation. C'est ce que confirme l'expérience : la raie à 1 300 cm^{-1} attribuée au mode interne est très fine (cf. fig. 13.8). À partir de l'expression dimensionnée de la fréquence du mode interne $\omega_i = \omega_0 \sqrt{3/2}$, on obtient le nombre d'onde $\sigma_i = \omega_i/c/2\pi/100 = 1\,094$ cm^{-1}, proche de la valeur de 1 300 cm^{-1} obtenue expérimentalement. Il faut noter que la fréquence du mode interne d'un soliton dépend fortement de sa forme exacte. L'approximation que nous avons

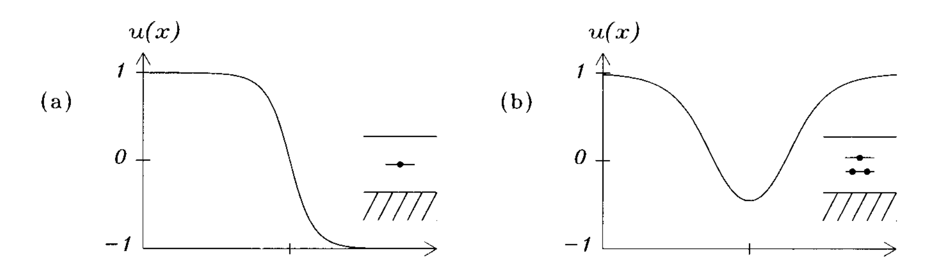


FIG. 13.9 – Comparaison d'un soliton (a) et d'un polaron (b) et de leur structure électronique associée dans la bande interdite (la partie hachurée représente schématiquement la bande de valence).

faite en remplaçant le potentiel exact par une approximation de type ϕ^4 (cf. fig. 13.6) est moins bien adaptée lorsqu'on cherche à calculer la fréquence du mode interne du soliton que lorsqu'on veut seulement déterminer la forme ou l'énergie du soliton. Il ne faut donc pas espérer obtenir un résultat quantitativement correct pour le mode interne avec le modèle analytique simple que nous avons choisi.

Pour faire une étude analytique du couplage entre le mode interne et le mode de translation du soliton, on pourrait encore utiliser une approche de coordonnées collectives, dans l'esprit de ce qui a été proposé par D.K. Campbell *et al.* [34]. Pour cela, il faut introduire une solution de la forme

$$\phi(\xi, \tau) = \tanh(\alpha(\tau)\,(\xi - X(\tau))) \quad , \tag{13.81}$$

qui donnera un lagrangien effectif dont on pourra tirer deux équations couplées pour $\alpha(\tau)$ et $X(\tau)$.

13.7 Les autres excitations non-linéaires du polyacétylène

Les solitons topologiques comme ceux que nous venons de décrire ne sont pas les seules excitations localisées possibles dans le polyacétylène. Les simulations numériques ont ainsi montré que l'injection d'un électron sur une chaîne homogène en l'absence de soliton conduit à la formation d'une excitation non topologique, le *polaron*, qui correspondrait à une paire de soliton-antisoliton liés, mais dont la pente au centre ne serait pas celle du soliton.

La figure 13.9 permet de faire une comparaison entre un soliton et un polaron à partir de la variable de distorsion u, reliée aux déplacements des atomes par l'expression $U_n = (-1)^n\, u$. L'électron injecté a déformé le réseau dans son voisinage, permettant la création d'un minimum de la fonction $u(x)$ qui autorise la création d'un état localisé supplémentaire plus stable que celui obtenu en mettant l'électron dans la bande de valence.

Il est même possible d'envisager d'introduire un second électron sur le niveau du polaron qui en possède un seul : on créerait alors un *bipolaron*. Dans le cas du polyacétylène, le calcul montre que celui-ci n'est pas stable : il diminue son énergie en formant une paire soliton-antisoliton, qui se séparent, chacun emmenant l'un des deux électrons. Les bipolarons ont peut-être cependant un intérêt qui va au-delà du cas du polyacétylène, car une des théories modernes de la supraconductivité à haute température, propose un mécanisme reposant sur des bipolarons qui, bien que non confirmé, semble cohérent avec les résultats expérimentaux. Dans cette approche non conventionnelle proposée par Serge Aubry, ce sont les effets de réseau qui stabilisent le bipolaron. Cette proposition est fondamentalement différente de la théorie Bardeen-Cooper-Schrieffer (BCS), dans laquelle deux électrons d'une même paire ont le même vecteur d'onde sans avoir la même position spatiale. On retrouve ici le changement de point de vue apporté par la physique des excitations non-linéaires que nous avions déjà mentionné à propos du problème de Fermi-Pasta-Ulam : la théorie non-linéaire implique une localisation dans l'espace direct alors que les théories conventionnelles travaillent dans l'espace réciproque, transformée de Fourier spatiale de l'espace réel.

Quatrième partie

Excitations non-linéaires dans les molécules biologiques

Avant-propos

COMPTE TENU DE LA COMPLEXITÉ des phénomènes biologiques à l'échelle moléculaire, il peut apparaître comme une gageure d'en envisager une modélisation physique. Il existe cependant un certain nombre de processus fondamentaux, reposant sur des mécanismes physico-chimiques bien établis, que l'on peut espérer décrire théoriquement afin de mieux les comprendre. La démarche est de mettre au point un modèle relativement simple mais rendant compte convenablement des observations expérimentales ; il s'agit donc de déterminer les mécanismes dominants dans le processus que l'on étudie.

Depuis le début des années 1990 on note un engouement grandissant pour ce type de modélisation physique des processus biologiques en raison de la conjonction de deux effets :

- La biologie moléculaire a fait des progrès tout à fait considérables. Elle peut désormais donner des informations expérimentales très détaillées (notamment au niveau de la structure, mais parfois aussi de la dynamique), permettant de construire des modèles sur des bases précises.
- Le développement de l'analyse des systèmes non-linéaires depuis le milieu des années 1970 a introduit de nouveaux concepts, comme celui de soliton, qui peuvent fournir un bon point de départ pour la modélisation, bien qu'il faille être prudent dans leur application aux systèmes biologiques.

Trois processus physiques jouent un rôle très important dans le fonctionnement des molécules biologiques que sont les protéines et l'ADN :

- le stockage et le transfert d'énergie ;
- les changements de conformation des molécules qui sont indispensables dans beaucoup de leurs fonctions ;
- le transport de charges (électrons mais aussi protons).

L'énergie nécessaire à l'activité des protéines provient très souvent de l'hydrolyse de la molécule d'adénosine tri-phosphate (ATP). Celle-ci se lie à un site récepteur particulier de la protéine et réagit avec l'eau pour libérer environ 0,42 eV. Cette quantité d'énergie est très grande à l'échelle moléculaire (de l'ordre de 20 $k_{\mathrm{B}}T$) mais elle ne peut être efficace que si elle n'est pas rapidement distribuée à tous les degrés de liberté de la protéine par équipartition de l'énergie, c'est-à-dire si elle reste localisée. Elle pourrait être stockée

temporairement sous forme électronique, mais il est également possible qu'elle soit localisée par effet non-linéaire et même éventuellement transportée sous la forme d'excitations non-linéaires. Cette hypothèse est encore controversée pour les protéines mais des expériences récentes sur des cristaux moléculaires possédant des liaisons analogues aux liaisons peptidiques des protéines ont montré que le piégeage d'énergie vibrationnelle par effet non-linéaire pouvait exister dans ces systèmes modèles [47]. De plus, l'idée est intéressante à examiner, car le modèle correspondant contient des concepts de portée assez générale. C'est ce que nous ferons dans le chapitre 14.

Les changements de conformation des molécules interviennent quant à eux dans la dynamique des protéines, tout particulièrement dans le fonctionnement des enzymes, mais ils sont encore plus fondamentaux pour l'ADN car la lecture du code génétique ne pourrait pas se faire sans un déroulement local de la molécule. Cette ouverture locale de la double hélice demande la rupture de nombreuses liaisons hydrogène (typiquement 50) et nécessite une grande concentration d'énergie dans une petite zone de la molécule. Comme il est admis que cette énergie n'est pas apportée par des réactions chimiques, il est possible d'envisager un phénomène de localisation d'énergie par non-linéarité, de manière analogue au processus d'autofocalisation. Le processus de transcription d'un gène est cependant très complexe car il fait intervenir l'interaction d'un enzyme avec l'ADN. Il n'est probablement pas encore accessible à la modélisation physique mais il existe un processus purement physique qui s'en rapproche : la formation de « bulles de dénaturation thermique » de l'ADN qui correspondent à des ouvertures locales de la double hélice induites par chauffage. L'étude de ce phénomène peut être vue comme une première étape vers la modélisation physique de la transcription et elle peut servir à valider des modèles d'ADN. Nous présenterons certains développements récents de cette approche dans le chapitre 15.

Un troisième problème non résolu à l'heure actuelle est celui du transport protonique à travers ou le long des membranes. Un mécanisme purement diffusif pourrait être envisagé, mais un certain nombre de questions restent cependant en suspens. Comment ce mécanisme pourrait-il assurer la cohérence du transport nécessaire à une fonction biologique ? Comment pourrait-il être assez efficace pour assurer les flux de protons élevés parfois nécessaires ? Comment expliquer les résultats expérimentaux montrant que le transport de protons est pratiquement indépendant de la différence de pH de part et d'autre de la membrane ? Ce résultat n'est en effet pas compatible avec une diffusion sous l'effet d'un gradient de concentration. On peut envisager un transport le long de chaînes de liaisons hydrogène qui s'étendent d'un côté à l'autre de la membrane soit parce qu'elles appartiennent à des protéines transmembranaires, soit parce que certaines protéines, comme la gramicidine, forment de véritables canaux unidimensionnels contenant des chaînes de molécules d'eau. Des modèles faisant intervenir des mouvements cohérents de protons dans les chaînes à liaisons hydrogène ont été proposés. Leur validité

dans le contexte biologique n'étant pas encore établie nous ne les présentons pas dans cet ouvrage mais une introduction à ces concepts peut être trouvée dans la référence [124].

Dans toutes ces applications l'utilisation de la notion de soliton est sans aucun doute abusive mais elle fournit une bonne base pour le développement de modèles. Il n'y a en effet guère de doute que ces processus biologiques sont dominés par les phénomènes non-linéaires. L'énergie relâchée localement par l'hydrolyse de l'ATP est très importante à l'échelle moléculaire. De même, les rotations de 180° des paires de base de l'ADN ne sont manifestement pas des phénomènes harmoniques. Par ailleurs la grande taille des molécules biologiques permet des comportements collectifs de certains groupes d'atomes, de sorte que deux ingrédients fondamentaux pour l'existence des solitons, non-linéarité et coopérativité, sont présents.

Chapitre 14

Localisation et transport d'énergie dans les protéines

14.1 Le mécanisme proposé par Davydov

On appelle protéines les longues molécules formées par une succession d'amino-acides dont la structure typique est représentée sur la figure 14.1, le symbole R correspondant à une chaîne carbonée latérale qui dépend de l'amino-acide. Il existe 20 amino-acides différents qui s'assemblent par une

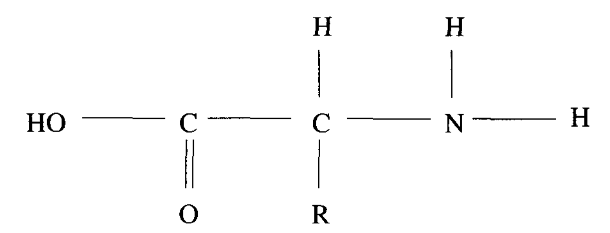


FIG. 14.1 – Représentation d'un amino-acide.

liaison dite peptidique, qui correspond à l'élimination d'une molécule d'eau entre la partie acide et le groupement NH. Il en résulte de longues chaînes comportant la répétition du même motif, comme le montre la figure 14.2. Ces chaînes se replient pour former la structure secondaire des protéines qui est stabilisée par la formation de liaisons hydrogène entre ces différents motifs. Les deux structures principales sont l'hélice–α représentée sur la figure 14.3 et une structure en feuille appelée feuille–β. Le mécanisme de Davydov pour la localisation et le transport d'énergie dans les protéines concerne l'hélice–α, que l'on rencontre souvent dans les membranes.

La réaction d'hydrolyse de l'ATP :

$$ATP^{4-} + H_2O \rightarrow ATP^{3-} + HPO_4^{2-} + H^+ \quad , \qquad (14.1)$$

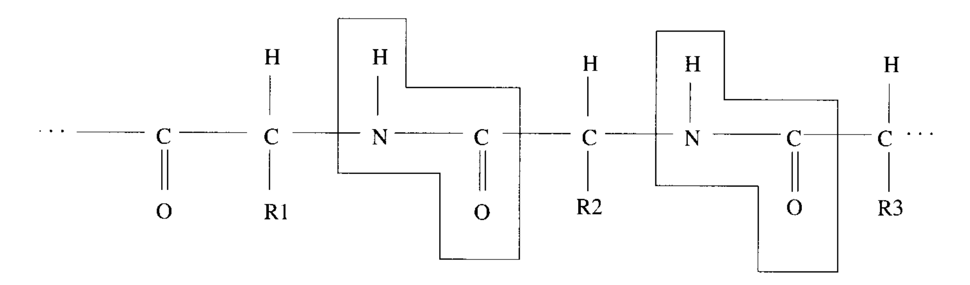


FIG. 14.2 – Chaîne d'amino-acides formant une portion de protéine.

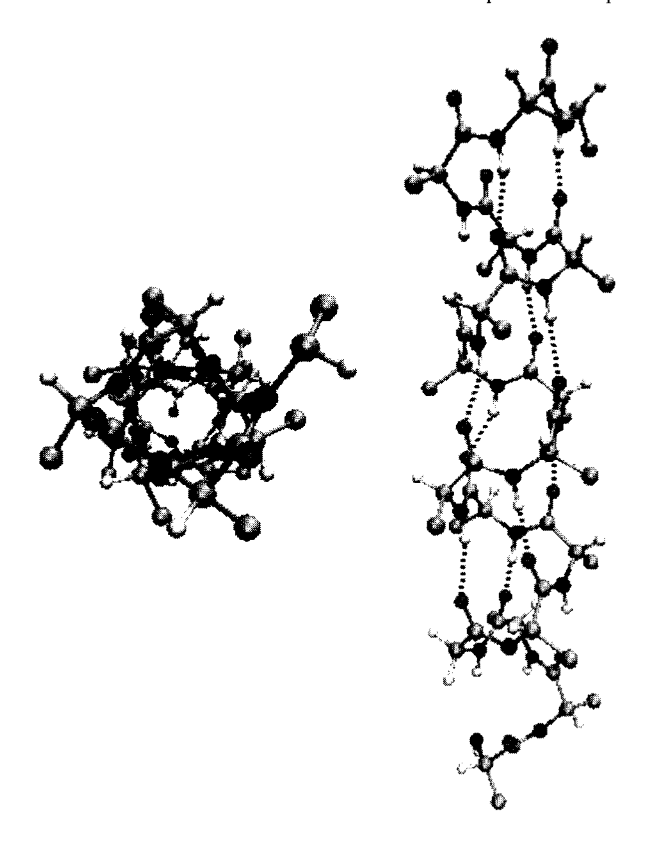


FIG. 14.3 – Vues de dessus et de côté d'une hélice alpha naturelle (portion de la plus longue hélice–α de la phosphoglycerate kinase). Les lignes en pointillés correspondent aux liaisons hydrogène [153].

libère une énergie voisine de deux quanta $\hbar\omega$ du mode de vibration de la liaison $C = O$. Cette vibration est donc un candidat naturel pour le stockage de l'énergie d'hydrolyse de l'ATP. De plus, comme l'atome d'oxygène du groupement $C = O$ est engagé dans une liaison hydrogène qui contribue à maintenir

la géométrie de l'hélice, on peut penser que l'excitation de la liaison $C = O$ est couplée aux modes de déformation de l'hélice (modes de phonons). C'est ce que propose le modèle de Davydov qui considère que l'énergie transmise à la liaison $C = O$ contribue à déformer localement l'hélice. Cette distorsion tend à modifier légèrement la fréquence de vibration de la liaison $C = O$ excitée qui cesse d'être résonante avec les autres liaisons $C = O$ du voisinage. Cela réduit le taux de transfert d'énergie vers ces liaisons $C = O$ du voisinage, et maintient donc l'énergie d'hydrolyse de l'ATP sous une forme localisée.

Ainsi ce processus d'auto-localisation de l'énergie fonctionne sur des principes tout à fait analogues à celui rencontré en optique (cf. chap. 3) :

– l'énergie injectée dans le milieu modifie les caractéristiques du milieu ;
– cette modification du milieu tend à renforcer la localisation.

Cependant, il existe une différence essentielle avec le phénomène tridimensionnel de l'optique, puisque les protéines sont essentiellement unidimensionnelles. Le processus de contre réaction positive ne se termine donc pas par une divergence de la densité d'énergie, mais par la formation d'une excitation non-linéaire stable, de type « soliton », et solution d'une équation de Schrödinger non-linéaire (NLS) !

14.1.1 L'hamiltonien de Davydov

Afin de simplifier les calculs, nous allons décrire les protéines, ou plus exactement le modèle proposé [42] par Davydov, en considérant le cas d'une seule chaîne (dans laquelle les radicaux R liés aux carbones et les hydrogènes latéraux ne sont pas indiqués) :

$$H - N - C = O ... \underbrace{H - N - C = O ...}_{\text{maille } n \text{ du modèle}} H - N - C = O ... \quad . \tag{14.2}$$

Il est nécessaire de tenir compte de la présence des trois chaînes parallèles de l'hélice–α pour déterminer les paramètres du modèle ainsi que les conditions d'existence des solitons de Davydov. On peut néanmoins obtenir une description approximative en triplant simplement certains paramètres du modèle à une chaîne, et comme les idées physiques sont déjà contenues dans la description à une chaîne, nous nous limiterons à ce cas.

Jusqu'à présent, lorsque nous avons étudié la dynamique des réseaux cristallins, que ce soit dans le cadre du modèle Fermi-Pasta-Ulam (FPU) ou lors de la description des ferroélectriques, nous avons utilisé des modèles classiques. Dans le cas des protéines, on ne peut pas ignorer les effets quantiques puisque les fréquences des modes qui interviennent sont élevées, notamment celle de la liaison $C = O$. Ceci est renforcé par le fait que le nombre de quanta mis en jeu est faible, puisque l'hydrolyse de l'ATP ne correspond qu'à deux quanta d'énergie de cette vibration.

Il faut donc considérer un hamiltonien quantique et, comme dans la modélisation des chaînes de polymère, le plus facile est de le faire dans le cadre du

formalisme de la seconde quantification pour la partie concernant la liaison $C = O$.

Cet hamiltonien est la somme de trois contributions :

$$H = H_e + H_{ph} + H_{int} \quad . \tag{14.3}$$

– Le premier terme H_e, appelé hamiltonien d'exciton, correspond aux liaisons $C = O$. Nous noterons B_n^+, l'opérateur création d'un quantum d'excitation $C = O$ dans la maille n. L'opérateur donnant le nombre d'excitations dans la liaison $C = O$ s'écrit donc $B_n^+ B_n$. L'énergie d'un quantum de la liaison $C = O$ sera notée $E_0 = \hbar\omega_{C=O}$, où la pulsation $\omega_{C=O}$ est de l'ordre de 1 600 cm^{-1}. L'hamiltonien correspondant à l'exciton est de la forme :

$$H_e = \sum_n E_0 B_n^+ B_n - J\left(B_{n+1}^+ B_n + B_n^+ B_{n+1}\right) \quad . \tag{14.4}$$

Le premier terme correspond à l'énergie de vibration au niveau de la maille n, alors que le terme de couplage traduit le fait que lorsque l'on place de l'énergie sur un site, le système peut abaisser son énergie (le coefficient de couplage J étant positif) en transférant une partie de l'excitation sur les sites voisins. Le terme $B_{n+1}^+ B_n$ correspond en effet à la destruction d'un quantum au site n et à sa création au site $n + 1$. C'est donc bien un terme de transfert d'énergie du site n vers le site $n + 1$ et de même le terme $B_n^+ B_{n+1}$ correspond au transfert du site $n + 1$ vers le site n.

– L'hamiltonien des phonons H_{ph} traduit les déformations de la chaîne. Notons U_n l'opérateur correspondant au déplacement du groupe peptidique et considérons uniquement son déplacement le long de la chaîne supposée unidimensionnelle. Notons P_n, l'opérateur moment conjugué de U_n, régi par la condition de commutation usuelle $[U_n, P_{n'}] = i\hbar\delta_{nn'}$, où δ est le symbole de Kronecker habituel. Il est important de préciser que les opérateurs correspondant à deux sites différents agissent sur des espaces d'états différents et par conséquent commutent. Il en est de même pour les opérateurs de H_e bien évidemment.

Dans le cadre d'une approximation harmonique, l'hamiltonien des phonons s'écrit

$$H_{ph} = \sum_n \frac{P_n^2}{2m} + \frac{K}{2}\left(U_{n+1} - U_n\right)^2 \quad , \tag{14.5}$$

où K est la constante de couplage entre deux groupes peptidiques voisins. Nous avons déjà établi qu'un tel hamiltonien harmonique pouvait être diagonalisé en passant dans l'espace de Fourier, c'est-à-dire en introduisant les modes normaux du système ; pour bien préciser les choses, nous supposerons que la chaîne est constituée de N mailles et nous prendrons des conditions aux limites périodiques. En notant a_q^+, l'opérateur de création d'un phonon

de vecteur d'onde q et en généralisant les expressions habituelles rencontrées pour l'oscillateur harmonique, on aboutit aux expressions suivantes :

$$U_n = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_q \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_q}}\, e^{i2\pi qn/N} \left(a_{-q}^+ + a_q\right) \quad , \tag{14.6}$$

$$P_n = \frac{i}{\sqrt{N}} \sum_q \sqrt{\frac{1}{2} m\hbar\omega_q}\, e^{i2\pi qn/N} \left(a_{-q}^+ - a_q\right) \quad , \tag{14.7}$$

où q est un entier vérifiant $-N/2 < q \leq N/2$ et $\omega_q = 2\sqrt{K/m}\,|\sin(\pi q/N)|$.

Les transformées de Fourier discrètes introduites ci-dessus vérifient comme il se doit, les deux égalités suivantes :

$$\sum_{n=0}^{N-1} e^{i2\pi(q-q')n/N} = N\delta_{qq'} \quad , \tag{14.8}$$

$$\sum_{q=-N/2+1}^{N/2} e^{i2\pi q(n-n')/N} = N\delta_{nn'} \quad . \tag{14.9}$$

En terme de modes normaux, l'hamiltonien des phonons peut se réécrire :

$$H_{ph} = \sum_q \hbar\omega_q \left(a_q^+ a_q + \frac{1}{2}\right) \quad . \tag{14.10}$$

– L'hamiltonien d'interaction correspond quant à lui à la partie cruciale de l'hamiltonien de Davydov, puisqu'il traduit la variation de l'énergie de vibration de la liaison $C = O$ lorsque la distance entre les groupes peptidiques est modifiée. Cette variation est une conséquence de la modification de la distribution électronique sur l'oxygène quand l'hydrogène s'approche ou s'éloigne. On choisit donc un terme d'interaction de la forme :

$$H_{int} = \sum_n \chi\left(U_{n+1} - U_n\right) B_n^+ B_n \quad . \tag{14.11}$$

Le terme $\chi\left(U_{n+1} - U_n\right)$ apparaît ainsi comme une correction à l'énergie E_0 de la partie H_e de l'hamiltonien, le paramètre χ étant positif. Le choix de prendre un couplage entre les sites n et $n+1$, plutôt qu'une version faisant intervenir le site $n-1$ ou bien une version symétrisée, est justifié par le fait que la liaison $C = O$ est effectivement placée entre les deux groupes peptidiques n et $n+1$, caractérisés par U_n et U_{n+1} respectivement.

On peut noter que les hamiltoniens H_e et H_{ph} sont purement harmoniques. La non-linéarité du système est introduite par le couplage entre les degrés de liberté correspondants aux excitons et aux phonons, décrit par H_{int}.



ALEXANDER S. DAVYDOV (1912-1993), né à Eupatoria en Ukraine puis arrivé à Moscou en 1931, commença par travailler comme ouvrier-lustreur dans une usine d'automobiles, dans la pure tradition soviétique de l'époque. C'est à la faveur de cours du soir à la faculté des travailleurs qu'il commença sa formation avant de réussir avec succès ses examens à la prestigieuse université d'état de Moscou en 1933. Il étudia tout d'abord la théorie statistique de la diffusion de la lumière en matière condensée sous la direction du physicien russe I.E. Tamm (1895-1971) qui obtint le prix Nobel en 1958 pour l'interprétation de l'effet Cherenkov.

Après avoir dirigé pendant la Seconde Guerre mondiale un laboratoire consacré aux rayons X dans une usine de fabrication d'avions, Davydov s'installa à Kiev pour étudier les cristaux moléculaires, et notamment leur absorption de la lumière. De retour à Moscou en 1953, il développa la théorie des excitations collectives dans les noyaux atomiques, avant de retourner définitivement à Kiev en 1964. Il y mena une activité scientifique intense et mondialement reconnue, dont on retiendra notamment : la levée de dégénérescence de Davydov, la théorie des noyaux non-axiaux, et bien sûr le concept de soliton moléculaire dans les molécules biologiques (Photographie Larissa Brizhik).

14.1.2 La méthode variationnelle de l'ansatz D_2

La description du transport d'énergie dans la protéine suppose la résolution d'un problème aux conditions initiales : on veut pouvoir se donner une distribution des états d'excitation des liaisons $C = O$ (en considérant par exemple que la liaison située à l'extrémité de la protéine est excitée localement par l'hydrolyse de l'ATP) et étudier ce qu'elle devient ultérieurement.

Il s'agit donc de résoudre une équation de Schrödinger dépendant du temps. Compte tenu de la complication de l'hamiltonien (14.3) et notamment du couplage entre les deux degrés de liberté, la résolution exacte n'est pas possible. Différentes solutions approchées ont été proposées. Plutôt que celle proposée par Davydov, nous allons présenter ici la plus simple [79], connue sous le nom d'« ansatz D_2 », qui correspond à une méthode variationnelle. Le calcul revient à résoudre l'équation de Schrödinger dans un sous espace de l'espace des états, qui est déterminé par la forme que l'on choisit pour la

solution approchée. Cette solution, que nous appellerons le « ket d'essai », dépend d'un certain nombre de paramètres que l'on va calculer à partir de la condition initiale et dont on va déterminer l'évolution temporelle.

Les deux premiers termes de l'hamiltonien, H_e et H_{ph}, agissent sur des espaces différents puisque le premier agit sur les variables de la vibration $C = O$ alors que l'autre agit sur les mouvements des groupes peptidiques. En l'absence du terme d'interaction H_{int}, l'hamiltonien serait donc constitué d'une somme de deux opérateurs qui commutent et il serait possible d'écrire le ket d'état du système comme le produit tensoriel

$$|\psi(t)\rangle = |\phi_e\rangle \bigotimes |\phi_{ph}\rangle \quad . \tag{14.12}$$

Dans l'approximation de l'ansatz D_2, on conserve ce découplage tout en tenant compte du terme d'interaction. On peut donc considérer que cet ansatz néglige le mélange entre excitons et phonons puisqu'en général, un ket d'état d'un espace $\mathcal{E}_e \bigotimes \mathcal{E}_{ph}$ ne se réduit pas à un simple produit. La méthode de résolution consiste donc à se donner un ket, solution approchée du problème, dans chacun des espaces $\mathcal{E}_e$ et $\mathcal{E}_{ph}$.

Pour la partie exciton, on choisit le ket

$$|\phi_e\rangle = \sum_n a_n(t) B_n^+ |0\rangle_e \quad , \tag{14.13}$$

où $|0\rangle_e$ correspond[1] à un état du vide pour les excitations $C = O$; cela signifie que quel que soit le site n que l'on considère, on aura $B_n|0\rangle_e = 0$. L'opérateur B_n^+ crée en revanche un quantum d'excitation au site n. La probabilité que le $n^{\text{ième}}$ site soit excité par un quantum d'énergie est donnée par

$$\left|\langle 0|_1 \ldots \langle 0|_{n-1} \langle 1|_n \langle 0|_{n+1} \ldots \langle 0|_N |\phi_e\rangle\right|^2 = |a_n|^2 \quad , \tag{14.14}$$

ce qui précise la signification physique des coefficients a_n qui figurent dans l'expression de $|\phi_e\rangle$.

Nous allons faire en outre l'hypothèse que la chaîne de liaisons $C = O$ n'est excitée que par un seul quantum de vibration $C = O$, ce qui donne la condition $\sum_n |a_n|^2 = 1$. Comme l'hydrolyse de l'ATP fournit approximativement deux quanta, certains ansatz plus complets ont été proposés mais les calculs se compliquent rapidement sans apporter d'idée réellement nouvelle c'est pourquoi nous ne les présentons pas.

En ce qui concerne **la partie phonon**, on choisit un état cohérent de phonons, correspondant aux états quasi-classiques de l'oscillateur harmonique [63] dont nous rappelons brièvement les propriétés dans l'annexe C. Dans le cadre du modèle de Davydov, comme l'hamiltonien est une somme d'hamiltoniens

1. L'état noté $|0\rangle$ correspond en fait à l'état $(|0\rangle_1|0\rangle_2 \ldots |0\rangle_n \ldots)$ lorsque l'on explicite tous les sites.

d'oscillateurs indépendants de pulsation ω_q, on prendra l'état cohérent sous la forme

$$|\phi_{ph}\rangle = e^{\sum_q (\alpha_q a_q^+ - \alpha_q^\star a_q)} |0\rangle_{ph} \quad , \tag{14.15}$$

où $|0\rangle_{ph}$ correspond à l'état du vide dans l'espace $\mathcal{E}_{ph}$, tel que $\forall q,\ a_q|0\rangle = 0$.

Il est intéressant de faire apparaître explicitement les parties réelle et imaginaire du nombre complexe α_q pour chaque oscillateur en posant

$$\alpha_q = \sqrt{\frac{m\omega_q}{2\hbar}}\, \beta_q + i\sqrt{\frac{1}{2m\omega_q\hbar}}\, \Pi_q \quad , \tag{14.16}$$

où β_q et Π_q sont deux nombres réels. Le calcul direct à partir des relations liant U_n et P_n à a_q et a_{-q}^+ conduit à l'égalité

$$-\frac{i}{\hbar}\sum_n (\beta_n P_n - \Pi_n U_n) = \sum_q \alpha_q a_q^+ - \alpha_q^\star a_q \quad . \tag{14.17}$$

Les quantités β_n, Π_n, sont liées aux β_q, Π_q, par la transformation de Fourier discrète selon les expressions

$$\beta_q = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_n e^{-i2\pi qn/N}\, \beta_n \quad , \tag{14.18}$$

$$\Pi_q = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_n e^{-i2\pi qn/N}\, \Pi_n \quad . \tag{14.19}$$

On peut donc écrire

$$|\phi_{ph}\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\sum_n (\beta_n P_n - \Pi_n U_n)} |0\rangle_{ph} \quad . \tag{14.20}$$

Le calcul conduit aussi aux deux égalités :

$$\langle\phi_{ph}|U_n|\phi_{ph}\rangle = \beta_n \quad , \tag{14.21}$$

$$\langle\phi_{ph}|P_n|\phi_{ph}\rangle = \Pi_n \quad . \tag{14.22}$$

Ces résultats généralisent le résultat habituel pour un état cohérent de l'oscillateur harmonique ; l'expression est cependant plus compliquée car on considère des oscillateurs couplés.

Nous avons ainsi à notre disposition un « ket d'essai »

$$|\psi\rangle = |\phi_e\rangle \bigotimes |\phi_{ph}\rangle \quad , \tag{14.23}$$

dépendant des paramètres a_n, donnant l'état d'excitation de la liaison $C = O$, ainsi que des quantités β_n, Π_n, donnant la position moyenne et la quantité de mouvement d'un groupement peptidique. L'évolution temporelle de ce ket $|\psi\rangle$, déduite de la mécanique quantique, détermine l'évolution temporelle des différents paramètres, $\beta_n(t)$, $\Pi_n(t)$ et $a_n(t)$.

14.1.3 Les équations d'évolution des $\beta_n(t)$

Comme $|\psi\rangle = |\phi_e\rangle|\phi_{ph}\rangle$, et que U_n n'agit que sur $|\phi_{ph}\rangle$, on a

$$\langle U_n\rangle = \langle\phi_e|\langle\phi_{ph}|U_n|\phi_e\rangle|\phi_{ph}\rangle \tag{14.24}$$
$$= \langle\phi_e|\phi_e\rangle\langle\phi_{ph}|U_n|\phi_{ph}\rangle \tag{14.25}$$
$$= 1\ .\ \beta_n(t) \tag{14.26}$$

et de même $\langle P_n\rangle = \Pi_n$. Les équations vérifiées par β_n et Π_n sont donc données par les expressions quantiques habituelles pour l'évolution de la valeur moyenne d'une observable

$$\frac{\mathrm{d}\beta_n(t)}{\mathrm{d}t} = \frac{\mathrm{d}\langle U_n\rangle}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{i\hbar}\langle\psi(t)|[U_n, H]|\psi(t)\rangle \quad , \tag{14.27}$$
$$\frac{\mathrm{d}\Pi_n(t)}{\mathrm{d}t} = \frac{\mathrm{d}\langle P_n\rangle}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{i\hbar}\langle\psi(t)|[P_n, H]|\psi(t)\rangle \quad . \tag{14.28}$$

Le calcul de commutateurs est simplifié puisque les opérateurs phonons et excitons agissent sur deux espaces différents et par conséquent commutent ; il en est de même pour les opérateurs qui correspondent à deux sites différents.

À partir de la valeur du commutateur

$$[U_n, P_n] = i\hbar \quad , \tag{14.29}$$

on obtient

$$\frac{\mathrm{d}\langle U_n\rangle}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{m}\langle P_n\rangle = \frac{1}{m}\Pi_n(t) \quad , \tag{14.30}$$

qui donne la relation liant $\Pi_n(t)$ et $\beta_n(t)$, $\Pi_n(t) = m\ \mathrm{d}\beta_n(t)/\mathrm{d}t$.

Compte tenu des opérateurs qui commutent avec l'opérateur P_n, le commutateur $[P_n, H]$ se réduit à

$$[P_n, H] = \left[P_n, \sum_n \frac{K}{2}(U_{n+1} - U_n)^2\right] + \left[P_n, \sum_n \chi(U_{n+1} - U_n) B_n^+ B_n\right]$$
$$= C_1 + C_2 \quad . \tag{14.31}$$

Comme $[P_n, U_n^2] = -2i\hbar U_n$ et $[P_n, U_n] = -i\hbar$, on obtient

$$C_1 = \frac{K}{2}\left[P_n, \left(U_{n+1}^2 - 2U_nU_{n+1} + U_n^2\right) + \left(U_n^2 - 2U_{n-1}U_n + U_{n-1}^2\right)\right] \tag{14.32}$$
$$= \frac{K}{2}(2i\hbar U_{n+1} - 2i\hbar U_n - 2i\hbar U_n + 2i\hbar U_{n-1}) \tag{14.33}$$
$$= i\hbar K(U_{n+1} + U_{n-1} - 2U_n) \tag{14.34}$$

et

$$C_2 = \left[P_n, \chi(U_{n+1} - U_n) B_n^+ B_n + \chi(U_n - U_{n-1}) B_{n-1}^+ B_{n-1}\right] \tag{14.35}$$
$$= i\hbar\chi(B_n^+ B_n - B_{n-1}^+ B_{n-1}) \quad . \tag{14.36}$$

Or,

$$\langle B_n^+ B_n\rangle = \langle\phi_e|\langle\phi_{ph}|B_n^+ B_n|\phi_e\rangle|\phi_{ph}\rangle \tag{14.37}$$
$$= \langle\phi_e|B_n^+ B_n|\phi_e\rangle\langle\phi_{ph}|\phi_{ph}\rangle = \langle\phi_e|B_n^+ B_n|\phi_e\rangle \quad . \tag{14.38}$$

À partir de la définition (14.13), on a :

$$B_n^+ B_n|\phi_e\rangle = B_n^+ B_n \sum_m a_m(t) B_m^+|0\rangle_e \tag{14.39}$$
$$= \sum_m a_m(t)\ B_n^+ B_n \quad \underbrace{B_m^+\ |0\rangle_e}_{=|0\rangle|0\rangle\ldots|1\rangle_m|0\rangle\ldots} \tag{14.40}$$
$$= \sum_m a_m(t)\ B_n^+ B_n \delta_{nm}|0\rangle|0\rangle\ldots|1\rangle_m|0\rangle\ldots \tag{14.41}$$
$$= a_n(t)\ |0\rangle|0\rangle\ldots|1\rangle_n|0\rangle\ldots \quad . \tag{14.42}$$

Par conséquent,

$$\langle\phi_e|B_n^+ B_n|\phi_e\rangle = \sum_m a_m^\star\ {}_e\langle 0|\, a_n\Big(|0\rangle\ldots|0\rangle_{n-1}|1\rangle_n|0\rangle_{n+1}\ldots\Big) = |a_n|^2. \tag{14.43}$$

On obtient donc :

$$\frac{\mathrm{d}\Pi_n}{\mathrm{d}t} = \frac{\mathrm{d}\langle P_n\rangle}{\mathrm{d}t} = K\big(\beta_{n+1}(t) + \beta_{n-1}(t) - 2\beta_n(t)\big) + \chi\left(|a_n|^2 - |a_{n-1}|^2\right). \tag{14.44}$$

En utilisant l'égalité (14.30), on aboutit finalement aux équations

$$m\frac{\mathrm{d}^2\beta_n}{\mathrm{d}t^2} = K\left(\beta_{n+1} - \beta_{n-1} - 2\beta_n\right) + \chi\left(|a_n|^2 - |a_{n-1}|^2\right) \quad . \tag{14.45}$$

14.1.4 Les équations d'évolution des $a_n(t)$

On peut obtenir un second ensemble d'équations liant les $a_n(t)$ et $\beta_n(t)$ en écrivant explicitement l'équation de Schrödinger

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}|\psi\rangle}{\mathrm{d}t} = H|\psi\rangle \tag{14.46}$$

pour le ket d'essai que nous avons choisi et en la projetant sur les kets de base. En explicitant le membre de gauche, on obtient ainsi :

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}|\psi\rangle}{\mathrm{d}t} = i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(|\phi_e\rangle|\phi_{ph}\rangle\right) \tag{14.47}$$

$$= i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left\{\left(\sum_n a_n(t)B_n^+|0\rangle_e\right)\left(e^{-\frac{i}{\hbar}\sum_n\left(\beta_n(t)P_n - \Pi_n(t)U_n\right)}|0\rangle_{ph}\right)\right\}$$

$$= \left(\sum_n i\hbar\frac{\mathrm{d}a_n}{\mathrm{d}t}B_n^+|0\rangle_e\right)|\phi_{ph}\rangle + |\phi_e\rangle\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}e^{-\frac{i}{\hbar}\sum_n\left(\beta_n(t)P_n - \Pi_n(t)U_n\right)}|0\rangle_{ph}\right) \quad . \tag{14.48}$$

Afin de simplifier le second terme, il est intéressant d'utiliser la propriété que les opérateurs correspondants à des indices différents commutent. Introduisons l'opérateur :

$$T_n = e^{-\frac{i}{\hbar}\left(\beta_n(t)P_n - \Pi_n(t)U_n\right)} \quad . \tag{14.49}$$

On peut donc réécrire la seconde parenthèse de l'équation (14.48) sous la forme :

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\prod_n T_n = \sum_n\left(\frac{\mathrm{d}T_n}{\mathrm{d}t}\prod_{n'\neq n} T_{n'}\right) \quad . \tag{14.50}$$

Pour expliciter cette équation, c'est-à-dire calculer $\mathrm{d}T_n/\mathrm{d}t$, il faut maintenant calculer la dérivée de l'exponentielle avec précautions car la dérivée de l'opérateur qu'elle contient ne commute pas avec l'opérateur lui-même. Cependant lorsque deux opérateurs C et D commutent avec leur commutateur $[C,D]$, on peut utiliser l'égalité

$$e^{C+D} = e^{-[C,D]/2}\, e^C\, e^D \quad , \tag{14.51}$$

qui se réduit à l'expression usuelle $e^{C+D} = e^C\, e^D$, valable pour des scalaires lorsque les deux opérateurs commutent.

Ici, à partir de $C = -i\beta_n(t)P_n/\hbar$ et de $D = i\Pi_n(t)U_n/\hbar$, on obtient l'expression du commutateur $[C,D] = -i\beta_n(t)\Pi_n(t)/\hbar$ qui commute bien évidemment avec C et D puisqu'il se réduit à un scalaire multiplicatif.

On a donc :

$$\frac{\mathrm{d}T_n}{dt} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(e^{\dfrac{i\beta_n(t)\Pi_n(t)}{2\hbar}}\, e^{-\dfrac{i}{\hbar}\beta_n(t)P_n}\, e^{\dfrac{i}{\hbar}\Pi_n(t)U_n}\right) \tag{14.52}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{i}{2\hbar}\left(\dot\beta_n\Pi_n + \beta_n\dot\Pi_n\right) e^{\dfrac{i\beta_n(t)\Pi_n(t)}{2\hbar}}\, e^{-\dfrac{i}{\hbar}\beta_n(t)P_n}\, e^{\dfrac{i}{\hbar}\Pi_n(t)U_n} \\
&\quad + e^{\dfrac{i\beta_n(t)\Pi_n(t)}{2\hbar}}\left(-\frac{i}{\hbar}\dot\beta_n(t)P_n\right) e^{-\dfrac{i}{\hbar}\beta_n(t)P_n}\, e^{\dfrac{i}{\hbar}\Pi_n(t)U_n} \\
&\quad + e^{\dfrac{i\beta_n(t)\Pi_n(t)}{2\hbar}}\, e^{-\dfrac{i}{\hbar}\beta_n(t)P_n}\left(\frac{i}{\hbar}\dot\Pi_n(t)U_n\right) e^{\dfrac{i}{\hbar}\Pi_n(t)U_n} \quad .
\end{aligned} \tag{14.53}$$

Pour simplifier cette expression, on réécrit le dernier terme en utilisant l'égalité

$$e^{\alpha P}\cdot U = U\cdot e^{\alpha P} - \left[U, e^{\alpha P}\right] = U\cdot e^{\alpha P} - i\hbar\,\alpha\, e^{\alpha P} = (U - i\hbar\alpha)\, e^{\alpha P} \quad . \tag{14.54}$$

On obtient alors :

$$e^{-\dfrac{i}{\hbar}\beta_n(t)P_n}\left(\frac{i}{\hbar}\dot\Pi_n(t)U_n\right) = \frac{i}{\hbar}\dot\Pi_n(t)\left(U_n - \beta_n(t)\right) e^{-\dfrac{i}{\hbar}\beta_n(t)P_n} \quad . \tag{14.55}$$

En utilisant l'équation (14.55) dans (14.53), on aboutit à :

$$\frac{\mathrm{d}T_n}{\mathrm{d}t} = \left[\frac{i}{2\hbar}\left(\dot\beta_n\Pi_n + \beta_n\dot\Pi_n\right) - \frac{i}{\hbar}\dot\beta_n(t)P_n + \frac{i}{\hbar}\dot\Pi_n(t)\left(U_n - \beta_n(t)\right)\right] T_n \tag{14.56}$$

$$= \left[\frac{i}{2\hbar}\left(\dot\beta_n\Pi_n - \beta_n\dot\Pi_n\right) - \frac{i}{\hbar}\left(\dot\beta_n(t)P_n - \dot\Pi_n(t)U_n\right)\right] T_n \quad . \tag{14.57}$$

En introduisant cette expression dans (14.50), il vient :

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\prod_n T_n = \sum_n\left(\frac{\mathrm{d}T_n}{\mathrm{d}t}\prod_{n'\neq n} T_{n'}\right) \tag{14.58}$$

$$\begin{aligned}
&= \sum_n\left(\left[\frac{i}{2\hbar}\left(\dot\beta_n\Pi_n - \beta_n\dot\Pi_n\right) - \frac{i}{\hbar}\left(\dot\beta_n(t)P_n - \dot\Pi_n(t)U_n\right)\right] T_n\prod_{n'\neq n} T_{n'}\right) \\
&= \left[-\frac{i}{2\hbar}\sum_n\left(\beta_n\dot\Pi_n - \dot\beta_n\Pi_n\right) - \frac{i}{\hbar}\sum_n\left(\dot\beta_n P_n - \dot\Pi_n U_n\right)\right] e^{-\frac{i}{\hbar}\sum_n \beta_n(t)P_n - \Pi_n(t)U_n}
\end{aligned} \tag{14.59}$$

qui explicite la seconde parenthèse de l'équation (14.48).

On vérifie bien que le premier terme est un terme supplémentaire dû à la non commutation des opérateurs, alors que le second correspond au terme que l'on aurait obtenu si on avait dérivé l'exponentielle d'un scalaire.

À partir de l'équation (14.48), on peut donc obtenir :

$$
\begin{aligned}
i\hbar\frac{\mathrm{d}|\psi\rangle}{\mathrm{d}t} &= \left(\sum_n i\hbar\frac{\mathrm{d}a_n}{\mathrm{d}t}B_n^+|0\rangle_e\right)|\phi_{ph}\rangle \\
&+ |\phi_e\rangle\left\{\sum_n\left(\dot{\beta}_n P_n - \dot{\Pi}_n U_n\right) + \frac{1}{2}\left(\beta_n\dot{\Pi}_n - \dot{\beta}_n\Pi_n\right)\right\}|\phi_{ph}\rangle \quad .
\end{aligned} \tag{14.60}
$$

Le calcul du terme de droite de l'équation (14.46) est heureusement plus simple ! On a en effet :

$$
\begin{aligned}
H|\psi\rangle &= \left(\sum_n E_0 B_n^+ B_n - J\left(B_{n+1}^+ B_n + B_n^+ B_{n+1}\right)\right)|\phi_e\rangle|\phi_{ph}\rangle \\
&+ \left(\sum_q \hbar\omega_q\left(a_q^+ a_q + \frac{1}{2}\right) + \sum_n \chi(U_{n+1} - U_n)B_n^+ B_n\right)|\phi_e\rangle|\phi_{ph}\rangle \quad .
\end{aligned} \tag{14.61}
$$

En utilisant l'égalité

$$
\sum_n B_n^+ B_{n+1}|\phi_e\rangle = \sum_n B_n^+ B_{n+1}\left(\sum_k a_k(t)B_k^+|0\rangle_e\right) \tag{14.62}
$$

$$
= \sum_n\sum_k a_k(t)B_n^+ \underbrace{B_{n+1}B_k^+}_{\delta_{n+1,k}}|0\rangle_e \tag{14.63}
$$

$$
= \sum_n a_{n+1}(t)B_n^+|0\rangle_e \quad , \tag{14.64}
$$

on aboutit à

$$
\begin{aligned}
H|\psi\rangle &= \sum_n E_0 a_n(t) B_n^+|0\rangle_e|\phi_{ph}\rangle - J\sum_n\left(a_{n-1} + a_{n+1}\right)B_n^+|0\rangle_e|\phi_{ph}\rangle \\
&+ H_{ph}|\phi_e\rangle|\phi_{ph}\rangle + \chi\sum_n a_n B_n^+|0\rangle_e\left(U_{n+1} - U_n\right)|\phi_{ph}\rangle \quad ,
\end{aligned} \tag{14.65}
$$

en utilisant aussi $B_n \sum_k a_k(t)B_k^+|0\rangle_e = a_n(t)|0\rangle_e$.

Écrivons maintenant l'égalité des deux équations (14.60) et (14.65), et faisons le produit par $\langle\phi_{ph}|\left(\langle 0|_1\langle 0|_2\ldots\langle 1|_n\ldots\langle 0|_N\right)$ dont le deuxième facteur permet de sélectionner les coefficients de $B_n^+|0\rangle_e$ dans les deux membres.

En tenant compte des deux équations (14.21) et (14.22), on obtient :

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}a_n}{\mathrm{d}t} = -\frac{1}{2}\underbrace{\left(\sum_k \dot{\beta}_k\Pi_k - \dot{\Pi}_k\beta_k\right)}_{=S} a_n + E_0 a_n - J\left(a_{n-1} + a_{n+1}\right)$$
$$+ \langle\phi_{ph}|H_{ph}|\phi_{ph}\rangle\, a_n + \chi a_n\left(\beta_{n+1} - \beta_n\right) \quad . \quad (14.66)$$

Le premier terme que nous noterons S provient de la compensation partielle des deux derniers termes de $\mathrm{d}|\psi\rangle/\mathrm{d}t$.

Calculons enfin le dernier terme non explicité de l'équation (14.66) :

$$W = \langle\phi_{ph}|H_{ph}|\phi_{ph}\rangle = \left\langle \phi_{ph}\left|\sum_q \hbar\omega_q\left(a_q^+ a_q + \frac{1}{2}\right)\right|\phi_{ph}\right\rangle \quad . \quad (14.67)$$

Étant donné que le ket $|\phi_{ph}\rangle$ est un produit d'états cohérents pour chaque indice q (cf. annexe C), on peut utiliser l'expression suivante :

$$|\phi_{ph}\rangle = e^{\sum\limits_q\left(\alpha_q a_q^+ - \alpha_q^\star a_q\right)}|0\rangle = \prod_q |\alpha_q\rangle \quad . \quad (14.68)$$

On a également :

$$\langle\alpha_q|a_q^+ a_q|\alpha_q\rangle = |\alpha_q|^2 \qquad \text{avec} \qquad \alpha_q = \sqrt{\frac{m\omega_q}{2\hbar}}\,\beta_q + i\frac{1}{\sqrt{2m\omega_q\hbar}}\,\Pi_q \quad . \quad (14.69)$$

On aboutit par conséquent à

$$W = \sum_q \frac{1}{2m}\left|\Pi_q\right|^2 + \frac{1}{2}m\omega_q^2\left|\beta_q\right|^2 + \frac{1}{2}\sum_q \hbar\omega_q \quad , \quad (14.70)$$

qui s'écrit dans l'espace direct :

$$W = \sum_n \frac{1}{2m}\Pi_n^2 + \frac{1}{2}K\left(\beta_{n+1} - \beta_n\right)^2 + \underbrace{\frac{1}{2}\sum_q \hbar\omega_q}_{W_0} \quad . \quad (14.71)$$

Les deux premiers termes de cette formule rappellent fortement l'énergie classique de vibration d'un réseau, alors que le dernier, noté W_0, est d'origine purement quantique et correspond à l'énergie de point zéro.

On peut, par ailleurs, arranger la quantité S définie dans l'équation (14.66), à l'aide des équations du mouvement pour β et Π obtenues précédemment, (14.30) et (14.44) :

$$S = \sum_k \frac{\Pi_k^2}{m} - \beta_k\left[\frac{K}{m}\left(\beta_{k+1} + \beta_{k-1} - 2\beta_k\right) + \frac{\chi}{m}\left(|a_k|^2 - |a_{k-1}|^2\right)\right) \quad . \quad (14.72)$$

En utilisant l'égalité

$$\sum_k (\beta_{k+1} + \beta_{k-1} - 2\beta_k)\,\beta_k = -\sum_k (\beta_{k+1} - \beta_k)^2 \quad , \tag{14.73}$$

on arrive finalement à

$$S = \sum_k \frac{\Pi_k^2}{m} + \sum_k \frac{K}{m}(\beta_{k+1} - \beta_k)^2 - \sum_k \frac{\chi}{m}\beta_k \left(|a_k|^2 - |a_{k-1}|^2\right) \quad . \tag{14.74}$$

Lorsque l'on reporte cette expression de S dans l'équation (14.66), on constate que les deux premiers termes de S annulent les deux premiers termes de W. Il ne reste donc que le terme d'énergie de point zéro W_0 qui correspond à une constante pour un réseau donné. On aboutit par conséquent à l'expression :

$$i\hbar \frac{\mathrm{d}a_n}{\mathrm{d}t} = \{\gamma(t) + \chi(\beta_{n+1} - \beta_n)\}\, a_n - J\,(a_{n-1} + a_{n+1}) \quad , \tag{14.75}$$

où le terme $\gamma(t) = E_0 + W_0 + \sum_k (\chi/m)\beta_k \left(|a_k|^2 - |a_{k-1}|^2\right)$ ne dépend pas de l'indice n.

Comme c'est $|a_n|^2$ qui a un sens physique, il est possible d'effectuer un changement de phase sur les a_n de manière à simplifier l'équation. Posons par conséquent :

$$a_n(t) = a'_n(t)\; e^{-\frac{i}{\hbar}\int_0^t \gamma(t')\mathrm{d}t'} = a'_n\; e^{i\theta(t)} \quad . \tag{14.76}$$

En reportant cette expression dans l'équation (14.75) et après simplification par $e^{i\theta}$, il reste :

$$i\hbar \frac{\mathrm{d}a'_n}{\mathrm{d}t} = \chi\,(\beta_{n+1}(t) - \beta_n(t))\, a'_n(t) - J\left(a'_{n-1}(t) + a'_{n+1}(t)\right) \quad . \tag{14.77}$$

La structure du dernier terme est analogue au début d'un laplacien discret (*i.e.* à une dérivée seconde), ce qui suggère d'introduire un nouveau changement de phase pour le compléter en rajoutant le terme $-2a'_n$. En posant

$$a'_n(t) = a''_n(t)\; e^{\frac{i2Jt}{\hbar}} = a''_n(t)\; e^{i\varphi(t)} \quad , \tag{14.78}$$

on obtient, après division par $e^{i\varphi}$,

$$i\hbar \frac{\mathrm{d}a''_n}{\mathrm{d}t} = \chi\,(\beta_{n+1}(t) - \beta_n(t))\, a''_n(t) - J\left(a''_{n-1}(t) + a''_{n+1}(t) - 2a''_n(t)\right) \quad . \tag{14.79}$$

Pour alléger les notations, nous omettrons désormais les $''$. Les variables $a''_n(t)$ ne diffèrent de toute manière des variables originales $a_n(t)$ que par un facteur

de phase, et nous serons amenés à calculer seulement le carré de leur module qui correspond à la probabilité d'excitation d'une liaison $C = O$ de sorte que la différence entre a et a'' est sans importance.

Les équations (14.45) et (14.79) sont les deux équations obtenues par Davydov à partir de l'ansatz D_2 grâce à une approximation classique. Il calculait la quantité $\langle\psi(t)|H|\psi(t)\rangle$ à l'aide de l'ansatz D_2 pour $|\psi(t)\rangle$, puis traitait l'énergie moyenne ainsi obtenue comme un « hamiltonien » classique pour les variables $a_n(t)$ et $\beta_n(t)$. Les équations d'Hamilton-Jacobi déduites de cet hamiltonien $H(a_n, a_n^\star, \beta_n, \Pi_n)$ redonnent en effet les deux équations (14.45) et (14.79). La méthode utilisée par Davydov peut donc être vue comme une méthode variationnelle appliquée à un problème dynamique puisque les équations classiques extrémalisent l'hamiltonien.

14.2 Étude des équations de Davydov

Le problème se résume donc à un système d'équations pour les variables complexes $a_n(t)$ décrivant l'état d'excitation des différentes liaisons $C = O$, et les variables réelles $\beta_n(t)$ donnant les positions moyennes des groupes peptidiques :

$$m\frac{\mathrm{d}^2\beta_n(t)}{\mathrm{d}t^2} = K\left(\beta_{n+1} + \beta_{n-1} - 2\beta_n\right) + \chi\left(|a_n|^2 - |a_{n-1}|^2\right) \quad , \tag{14.80}$$

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}a_n}{\mathrm{d}t} = -J\left(a_{n+1} + a_{n-1} - 2a_n\right) + \chi\left(\beta_{n+1} - \beta_n\right)a_n \quad . \tag{14.81}$$

Il s'agit d'un système d'équations non-linéaires dont la solution analytique n'est pas connue. On peut aisément en faire une étude numérique mais nous allons montrer qu'il est également possible de comprendre le mécanisme du soliton de Davydov en cherchant une solution approchée dans le cadre d'une approximation adiabatique : elle consiste à négliger le retard du réseau à s'adapter à la présence de la vibration $C = O$ sur le site n. Il faut bien voir qu'il ne s'agit pas de faire l'approximation que le réseau suit la vibration ; la fréquence d'oscillation de la liaison $C = O$ est beaucoup trop grande par rapport aux fréquences des phonons pour que cette approximation soit réaliste. En revanche, lorsque l'excitation de la liaison $C = O$ passe d'un site au site voisin, on suppose que la déformation locale du réseau autour de la liaison $C = O$ excitée se produit sans délai après ce transfert.

En négligeant par conséquent l'inertie des phonons dans l'équation (14.80), c'est-à-dire la dérivée seconde temporelle, on obtient

$$K\left(\beta_{n+1} - \beta_n\right) - K\left(\beta_n - \beta_{n-1}\right) = -\chi\left(|a_n|^2 - |a_{n-1}|^2\right) \quad , \tag{14.82}$$

dont une solution est

$$\left(\beta_{n+1} - \beta_n\right) = -\frac{\chi}{K}\,|a_n|^2 \quad . \tag{14.83}$$

En reportant cette expression dans l'équation (14.81), on aboutit à :

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}a_n}{\mathrm{d}t} = -J\left(a_{n+1} + a_{n-1} - 2a_n\right) - \frac{\chi^2}{K}|a_n|^2 a_n \quad . \tag{14.84}$$

On retrouve par conséquent une nouvelle fois l'équation de NLS, avec une non-linéarité contrôlée par le couplage entre la vibration $C = O$ et les phonons ; il est intéressant de noter que le signe du couplage χ est sans importance.

Néanmoins, nous avons obtenu ici une version *discrète* de l'équation de NLS, rencontrée auparavant. Cette équation n'est pas soluble de manière exacte, contrairement à l'équation très voisine suivante :

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}\psi_n}{\mathrm{d}t} = -J\left(\psi_{n+1} + \psi_{n-1} - 2\psi_n\right) - \frac{\chi^2}{2K}|\psi_n|^2\left(\psi_{n+1} + \psi_{n-1}\right) \quad , \tag{14.85}$$

connue sous le nom d'équation d'Ablowitz-Ladik. Ces deux équations donneront dans la limite des milieux continus, au premier ordre, la même équation de NLS. L'équation d'Ablowitz-Ladik, totalement intégrable, peut cependant être utilisée comme point de départ pour un calcul de perturbations utilisant la méthode inverse.

Revenons maintenant à l'équation (14.84), dans le cadre de l'approximation des milieux continus. En utilisant les notations désormais usuelles, on obtient

$$i\frac{\partial a}{\partial t} + P\frac{\partial^2 a}{\partial x^2} + Q|a|^2 a = 0 \quad , \tag{14.86}$$

dont la solution statique est

$$a(x,t) = a_0 \,\mathrm{sech}\left(\sqrt{\frac{Q}{2P}}\; a_0 x\right)\, e^{i\frac{Qa_0^2 t}{2}} \quad \text{avec} \quad \sqrt{\frac{Q}{2P}} = \sqrt{\frac{\chi^2}{2KJ}} \quad . \tag{14.87}$$

Contrairement au cas général de l'équation de NLS dans lequel l'amplitude du soliton est un paramètre libre, il faut ici tenir compte de la condition $\sum_n |a_n|^2 = 1$, qui exprime que l'on a excité un quantum de vibration $C = 0$. Elle correspond dans l'approximation des milieux continus à

$$\int |a(x,t)|^2 \mathrm{d}x = \int a_0^2 \,\mathrm{sech}^2\!\left(a_0\sqrt{\frac{\chi^2}{2KJ}}\, x\right) \mathrm{d}x = 1 \tag{14.88}$$

conduisant à $a_0 = \sqrt{\chi^2/2KJ}/2$.

La solution de l'équation (14.86) s'écrit donc finalement :

$$|a(x,t)|^2 = \frac{\chi^2}{8KJ}\,\mathrm{sech}^2\left(\frac{\chi^2}{4KJ}\; x\right) \quad . \tag{14.89}$$

Comme nous l'avons déjà vu, la largeur du soliton $L = 4KJ/\chi^2$ est l'élément qui déterminera si l'excitation est susceptible de se déplacer dans le réseau. En effet, si le soliton est trop étroit, il sera piégé par les effets de discrétisation, comme nous l'avons vu pour les kinks de l'équation de Frenkel-Kontorova (FK) ou du modèle ϕ^4. Le traitement du piégeage par la discrétisation est cependant ici nettement plus compliqué à cause de la dynamique interne du soliton et l'on ne connaît pas la condition exacte de piégeage. Cependant, les simulations numériques montrent que la condition intuitive que le soliton tend à se piéger quand sa largeur est de l'ordre de grandeur du pas du réseau reste valable.

Pour revenir au problème initial de la localisation de l'énergie dans les protéines, il faut estimer les valeurs des différents paramètres :

- La valeur de la constante de couplage K du réseau de phonons peut être obtenue expérimentalement à partir des courbes de dispersion de phonons, que l'on détermine par diffusion inélastique des neutrons par exemple. Cette valeur n'est cependant par encore très précise et le rôle du couplage entre les trois hélices de la protéine reste à clarifier. On admet généralement que K appartient à l'intervalle $[39 - 58{,}5]$ N/m, lorsque l'on tient compte des trois chaînes parallèles.

- Les valeurs de J ont été obtenues par le calcul des interactions dipolaires entre liaisons $C = O$ voisines. On retient généralement la valeur $J = 1{,}55 \cdot 10^{-22}$ J.

- La constante de couplage exciton-phonon χ est le paramètre le plus difficile à déterminer, car on la déduit de la dépendance en température des modes de vibration $C = O$ étudiés par spectroscopie Raman ou infra-rouge, ou bien à l'aide de calculs ab-initio. Ces derniers sont cependant très difficiles en raison de la nécessité de se limiter à un tout petit segment de molécule et de tronquer les bases choisies pour les fonctions d'onde. Or, en présence de liaisons hydrogène, les troncatures perturbent souvent significativement les résultats. On considère généralement que χ appartient à l'intervalle $[35 - 62] \cdot 10^{-12}$ N.

Ces estimations, considérées comme les meilleures dont on dispose actuellement [139], doivent être associées à la valeur de la masse $m = 5{,}7 \cdot 10^{-25}$ kg lorsque l'on tient compte des trois groupements peptidiques situés sur les trois chaînes. Ces valeurs permettent d'obtenir une largeur du soliton L comprise entre 6 et 30 mailles de la chaîne peptidique. Par conséquent, en admettant ces estimations, on pourra considérer que les effets de discrétisation seront faibles et que le soliton de Davydov peut effectivement correspondre à un « paquet d'énergie » qui se propage le long la molécule.

14.3 Le soliton de Davydov existe-t-il ?

Les calculs que nous venons de présenter ne suffisent évidemment pas à démontrer l'existence du soliton de Davydov. Plusieurs questions subsistent en effet :

i) Quelle est la validité de l'ansatz D_2 utilisé pour $|\psi\rangle$? De nombreuses tentatives ont été effectuées pour aller au delà de cet l'ansatz en partant de fonctions plus complètes. Ainsi, plutôt que de se limiter à un produit tensoriel, il est possible d'autoriser le mélange exciton-phonon. On peut également considérer plus d'un quantum d'énergie de vibration de la liaison $C = O$.

Ces calculs changent les résultats de manière quantitative, mais ne bouleversent pas les conclusions du modèle plus simple que nous avons présenté. La critique la plus sérieuse du modèle de Davydov ne se porte pas sur ce point bien que des résultats de D. Brown *et al.* [154] aient mis en évidence que la solution de Davydov est très grossière.

ii) Quel est le rôle des fluctuations thermiques ? C'est une critique beaucoup plus sérieuse et le problème n'est pas encore résolu. La localisation d'énergie nécessaire à l'existence du soliton de Davydov repose sur une distorsion locale du réseau, que les fluctuations thermiques ont tendance à moyenner irrémédiablement. Par conséquent de trop grandes fluctuations détruisent la stabilité du soliton. C'est tout particulièrement ici que la valeur du paramètre χ et le détail de l'ansatz deviennent importants de sorte que les choix des différents auteurs expliquent les résultats contradictoires qu'ils obtiennent parfois. Le traitement quantitatif des fluctuations thermiques dans un système quantique aussi complexe que l'hamiltonien de Davydov est encore un problème ouvert.

iii) Est-il effectivement possible de créer un soliton à partir d'une excitation localisée à une extrémité de la protéine à la suite de l'hydrolyse de l'*ATP* ? L'équation de NLS discrète (14.84) possède aussi des solutions *non localisées* dans la limite linéaire. Lorsque le nombre de mailles est suffisamment important dans la protéine, on peut également satisfaire la condition $\sum_n |a_n|^2 = 1$ tout en gardant les amplitudes a_n faibles. Il est donc tout à fait légitime de se demander si l'énergie aura effectivement tendance à se localiser spontanément pour former un soliton. Dans le cas de l'équation de NLS continue (3.25), l'étude montre qu'il existe un seuil pour la norme $\int dx|\psi|^2$ au delà duquel le système localise spontanément son énergie pour former des solitons. C'est une question très difficile dans le cadre des systèmes discrets puisqu'une discrétisation faible change qualitativement les résultats.

Cependant, en ce qui concerne les applications biologiques, la localisation spontanée de l'énergie n'est pas nécessaire puisque l'énergie d'hydrolyse de

l'ATP est *a priori* fournie localement. Les simulations numériques montrent que, si l'on se situe dans le domaine de paramètres où le soliton existe, une condition initiale localisée sur une maille peut évoluer spontanément en un soliton, plus un rayonnement de faible amplitude, de sorte que la plus grande partie de l'énergie fournie par l'hydrolyse de l'ATP restera bien localisée.

Les calculs actuels ne permettent donc pas de répondre avec certitude à la question de l'existence du soliton de Davydov. Seule une expérience pourrait trancher mais jusqu'à présent l'observation du transport d'énergie par un mode localisé n'a pas pu être réalisée. Une approche qui a été envisagée est de fixer des chromophores aux deux extrémités d'une hélice. Ce sont des molécules qui réalisent une conversion entre l'énergie lumineuse et celle de vibration, à l'aide de transfert d'énergie entre leurs niveaux électroniques et leurs niveaux vibrationnels. Le premier chromophore, excité par un laser, permettrait d'injecter de l'énergie vibrationnelle à l'extrémité d'une hélice. Si cette énergie se propage tout en restant localisée, sous la forme d'un soliton de Davydov, on devrait pouvoir détecter une émission retardée au niveau du deuxième chromophore situé à l'autre extrémité.

L'expérience est cependant très délicate puisque l'on travaille au niveau moléculaire, et qu'il est difficile d'exciter une extrémité sans toucher l'autre. On peut résoudre « simplement » ce problème, en utilisant deux chromophores différents, et sensibles à des longueurs d'ondes différentes ; il faut cependant réussir à les fixer de manière satisfaisante sur l'hélice de la protéine, et il faut que l'efficacité des transferts d'énergie entre les chromophores et la protéine soit suffisante.

À défaut du *transport* par soliton, la *localisation* d'énergie par effet non-linéaire selon un mécanisme analogue à celui qui donne naissance au soliton de Davydov a pu être mise en évidence expérimentalement sur un système modèle, le cristal d'acétanilide.

14.4 Un système physique modèle : le cristal d'acétanilide

L'étude expérimentale des protéines est difficile en raison de leur structure complexe, d'une part, et de la faible longueur des hélices α qui ne constituent qu'une partie de la protéine, d'autre part. Elles n'ont pas de structure parfaitement périodique comme on en a fait implicitement l'hypothèse dans la description que nous venons de présenter. Cela complique beaucoup les études par spectroscopie ou par diffraction de neutrons.

Une suggestion de Giorgio Careri a été de chercher des cristaux à liaisons hydrogène ayant des structures voisines de celles des protéines. C'est notamment le cas de l'acétanilide de formule $(CH_3 - CO - NH - C_6H_5)_n$, représentée sur la figure 14.4. La structure cristalline fait apparaître des

FIG. 14.4 – Représentation schématique de la maille d'acétanilide. Les liaisons en pointillés entre H et O correspondent aux liaisons hydrogène.

chaînes à liaisons hydrogène, dont la géométrie est voisine de celles des protéines.

Bien que l'interprétation des premières expériences ait été discutée pendant longtemps, des expériences récentes de spectroscopie « pompe-sonde » [47], qui permettent l'observation exclusive des effets non-linéaires, ont montré que l'auto-localisation de l'énergie existait bien dans un cristal d'acétanilide, mais que le mécanisme était plus compliqué que dans le cas du soliton de Davydov car il concerne, non seulement la liaison $C = O$, mais aussi la liaison $N - H$.

La première expérience qui a attiré l'attention sur les particularités de la dynamique de l'acétanilide a été l'observation de la variation avec la température de son spectre infra-rouge dans la zone des 1 600 cm^{-1}, réalisée par G. Careri, représentée sur la figure 14.5. Dans cette zone, on observe un mode à 1 665 cm^{-1} correspondant à l'élongation des liaisons $C = O$, et peu dépendant de la température. On peut cependant noter également la présence d'un mode à une fréquence légèrement inférieure (environ 1 650 cm^{-1}). Si sa fréquence ne varie pas avec la température, son amplitude décroît fortement avec elle. Il est ainsi très intense pour une température de 10 K, mais a pratiquement disparu à 300 K. Aucune interprétation « conventionnelle » ne peut expliquer ce phénomène puisque, si le fait que l'amplitude des modes décroît avec la température est une conséquence classique de l'harmonicité en spectroscopie, la fréquence du mode devrait être également affectée.

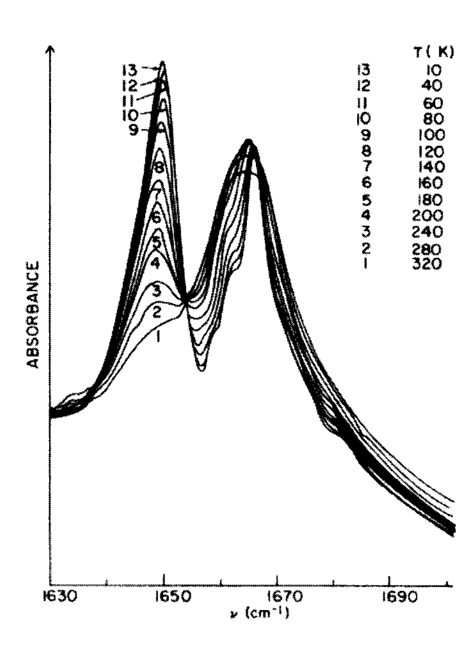


FIG. 14.5 – Spectre d'absorption infra-rouge de l'acétanilide pour différentes températures (d'après la référence [35]).

Des expériences récentes, effectuées dans le groupe de P. Hamm [47] ont permis de montrer que le mode « anormal » est bien un mode localisé par auto-localisation via un couplage entre la vibration de la liaison $C = O$ et un mode de phonon. L'observation est faite par une méthode « pompe-sonde ». Une première impulsion laser (la « pompe ») excite le système et une seconde, la « sonde » observe son comportement après un délai variable. Cette méthode élimine totalement la réponse des modes purement harmoniques. La réponse du système est en effet proportionnelle au carré de l'élément de matrice du moment dipolaire μ du système observé pris entre l'état initial et l'état final d'une transition. La pompe prend l'oscillateur harmonique dans son état fondamental $|0\rangle$ et l'amène dans l'état $|1\rangle$. La réponse du système à ce signal est proportionnelle à $\langle 0|\mu|1\rangle^2$. L'impulsion de sonde, qui suit avec un petit délai, agit sur le signal dans l'état $|1\rangle$ et peut provoquer soit sa désexcitation stimulée avec la probabilité de transition $\langle 0|\mu|1\rangle^2$ soit son excitation vers le niveau $|2\rangle$ avec une probabilité de transition $\langle 1|\mu|2\rangle^2$. L'expérience mesure la différence entre le signal avec l'onde de pompe et sans cette onde, qui comporte donc trois contributions :

- une absorption sous l'effet de la sonde (contribution négative) proportionnelle à $\langle 1|\mu|2\rangle^2$, affectant les molécules excitées à l'état $|1\rangle$ par la pompe ;
- une contribution positive due à l'émission stimulée de ces mêmes oscillateurs qui ont été excités par la pompe, proportionnelle à $\langle 0|\mu|1\rangle^2$;

– une autre contribution positive proportionnelle à $\langle 0|\mu|1\rangle^2$ provenant de la diminution de la population de l'état $|0\rangle$ sous l'effet de la pompe. Il y a moins d'absorption (qui serait une contribution négative) du signal de sonde dans l'état avec pompe que dans l'état sans pompe, ce qui donne bien la contribution positive indiquée quand on fait la différence des signaux.

Comme le moment dipolaire de l'oscillateur est proportionnel à sa coordonnée de position, il est facile de vérifier à partir des propriétés de l'oscillateur harmonique quantique que $\langle 1|\mu|2\rangle^2 = 2\langle 0|\mu|1\rangle^2$, de sorte que les deux contributions positives sont exactement compensées par la contribution négative.

Cette technique spectroscopique est donc parfaitement adaptée à la détection d'effets non-linéaires puisque la contribution linéaire est nulle. De plus, l'analyse de la contribution non-linéaire permet de calculer un « taux de participation » qui indique le degré de localisation du mode. L'idée est que, pour une intensité de signal donnée, si elle provient d'un état délocalisé sur N molécules, l'amplitude au niveau de chacune est $\sqrt{N}$ fois plus petite que si un seul site était excité. Ainsi le mode délocalisé est plus près du cas harmonique. Les mesures montrent sans ambiguïté que le mode à 1 665 cm^{-1} est parfaitement délocalisé (correspondant à un mode de phonon ordinaire) tandis que le mode à 1 650 cm^{-1} est localisé.

Il est possible d'analyser ces résultats par une théorie analogue à celle du soliton de Davydov dans les protéines. On peut comprendre l'idée aisément en raisonnant à partir des propriétés de l'équation de NLS pour un réseau et en s'aidant de la figure 14.6. Il existe non seulement les modes linéaires du système, situés dans la bande d'excitons (pour reprendre la dénomination habituellement utilisée pour les protéines), mais aussi des modes non-linéaires situés dans la bande interdite. Le mode situé à 1 650 cm^{-1} correspond à un tel mode, localisé par effet non-linéaire.

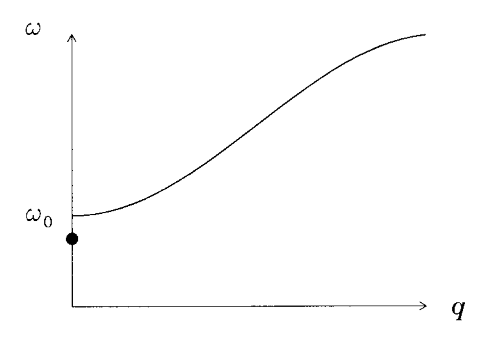


FIG. 14.6 – Représentation de la relation de dispersion de l'équation de NLS. La courbe continue correspond aux modes optiques $C = O$ alors que le symbole • représente la position du mode localisé non-linéaire.

La décroissance en température de l'amplitude de ce pic s'explique par le fait que sa localisation nécessite un mouvement cohérent du réseau qui est détruit lorsque les fluctuations thermiques sont trop importantes. En revanche, il n'y a pas de dérive de la fréquence puisque celle-ci est fixée par la condition de normalisation $\sum_n |a_n|^2 = 1$.

L'interprétation quantitative se fait par un hamiltonien analogue à celui de Davydov, avec tout d'abord, la contribution des excitons

$$H_e = \sum_n E_0 B_n^+ B_n - J\left(B_{n+1}^+ B_n + B_n^+ B_{n+1}\right) \quad , \tag{14.90}$$

comme pour le modèle de Davydov. Celle due aux phonons est choisie de la forme :

$$H_{ph} = \sum_n \frac{1}{2m} P_n^2 + \frac{K}{2} U_n^2 \quad . \tag{14.91}$$

Elle correspond à des oscillateurs localisés comme dans le modèle d'Einstein de physique des solides. Ils correspondent à un mode *optique* (de fréquence non nulle pour un vecteur d'onde nul, comme sur la figure 14.6) dont on néglige la dispersion, ce qui permet d'écrire l'hamiltonien de phonons comme une somme d'hamiltoniens d'oscillateurs indépendants. Enfin, l'hamiltonien d'interaction est décrit simplement par

$$H_i = \sum_n \chi_0 U_n B_n^+ B_n \quad . \tag{14.92}$$

On peut alors conduire un calcul analogue à celui présenté dans le cadre du modèle de Davydov, mais en prenant pour $|\phi_e\rangle$, les états cohérents associés aux oscillateurs locaux au lieu de devoir travailler avec leurs amplitudes a_q et $a_q^\star$ dans l'espace de Fourier. Le calcul aboutit à nouveau à une équation de Schrödinger discrète,

$$i\hbar \frac{\mathrm{d}a_n'}{\mathrm{d}t} + J\left(a_{n+1}' + a_{n-1}'\right) + \frac{\chi_0^2}{K}|a_n'|^2 a_n' = 0 \quad . \tag{14.93}$$

Comme les paramètres ne permettent pas de justifier l'approximation des milieux continus, il est inutile de faire le second changement de phase (14.78) qui permettait de faire apparaître une dérivée spatiale discrète. L'équation décrit l'évolution de $a_n' = a_n\, e^{i\Omega_0 t}$, où Ω_0 correspond à la pulsation du mode d'exciton non localisé (celui à l'origine du pic situé à 1 665 cm^{-1} sur la figure 14.5) : le facteur de phase est utile pour l'analyse de la réponse infra-rouge puisqu'il détermine l'évolution temporelle de l'excitation.

Il est possible d'obtenir une solution non propagative de l'équation (14.93) en la cherchant sous la forme

$$a_n'(t) = e^{-i\delta t/\hbar}\, \phi_n \quad , \tag{14.94}$$

en supposant les ϕ_n indépendants du temps. On recherche alors l'ensemble de ces valeurs ϕ_n sous la forme d'un vecteur colonne, ce qui conduit à l'équation aux valeurs propres suivante :

$$\delta \begin{pmatrix} \cdot \\ \phi_{n-1} \\ \phi_n \\ \phi_{n+1} \\ \cdot \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cdot & \cdot & & & \\ J & Q|\phi_{n-1}|^2 & J & & \\ & J & Q|\phi_n|^2 & J & \\ & & J & Q|\phi_{n+1}|^2 & J \\ & & \cdot & \cdot & \cdot \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cdot \\ \phi_{n-1} \\ \phi_n \\ \phi_{n+1} \\ \cdot \end{pmatrix} \tag{14.95}$$

où l'on a introduit le paramètre $Q = \chi_0^2/K$.

C'est une équation matricielle non-linéaire puisque la matrice tridiagonale fait intervenir les termes $|\phi_i|^2$. Elle peut être résolue de manière itérative, en se donnant un jeu initial de valeurs des ϕ_n tenant compte de la condition $\sum_n |\phi_n|^2 = 1$, puis en cherchant un vecteur propre normé de la matrice, qui donne un nouveau jeu de valeurs ϕ_n à l'itération suivante, et une première évaluation de la valeur propre δ. On continue ce processus itératif jusqu'à convergence, ce qui donne finalement la valeur du décalage de fréquence γ entre le mode exciton à 1 665 cm^{-1} et le mode localisé à 1 650 cm^{-1} et la distribution des amplitudes ϕ_n.

Dans le cas de l'acétanilide mais aussi de protéines différentes, il est possible d'étendre cette approche pour traiter le couplage entre un exciton et plusieurs modes de phonons. On obtient alors à nouveau des équations de NLS discrètes comme précédemment, mais avec des termes de couplage nettement plus compliqués. Leur équivalent matriciel fait intervenir des matrices qui ne sont *plus* tridiagonales comme l'était celle de l'équation (14.95). Ces équations NLS discrètes généralisées sont connues sous le nom d'équation de *self-trapping* et correspondent par conséquent à une généralisation très utile de l'équation de NLS [49]. Dans le cas de l'acétanilide, les expériences montrent par exemple qu'il n'y a pas que le mode de vibration $C = O$ qui est concerné. Le mode $N - H$, qui est lui aussi impliqué dans la liaison hydrogène comme le montre la figure 14.4, présente également des satellites non-linéaires correspondant à des modes localisés. Leur structure est même bien plus riche puisque 9 modes satellites ont été observés, correspondant à neufs états d'excitation du mode auto-localisé [48]. Cette expérience a montré également que la désexcitation de ces modes non-linéaires est 20 fois plus rapide pour l'acétanilide en solution dans l'acétone que pour la forme cristalline, montrant le rôle de l'organisation périodique du cristal qui intervient par ses phonons comme le calcul nous l'a montré.

Chapitre 15

Dynamique non-linéaire et physique statistique de l'ADN

LA CÉLÈBRE DÉCOUVERTE de la structure en double hélice de l'ADN a attiré l'attention sur la relation entre structure et fonction pour les molécules biologiques. Il faut cependant se garder de considérer l'ADN comme une molécule dont la structure est figée. En fait, la molécule d'ADN est un objet très dynamique, qui est constamment agité de mouvements de très grande amplitude que l'on peut mettre en évidence expérimentalement, et qui jouent un rôle essentiel dans son fonctionnement. Comprendre et modéliser cette dynamique très non-linéaire est une question intéressante pour le physicien, et les modèles peuvent ensuite être utilisés pour répondre à des questions d'intérêt biologique.

Dans ce chapitre nous allons introduire un modèle très simple de l'ADN. Nous verrons qu'il permet déjà de décrire des propriétés très importantes de la molécule. Mais bien entendu, quand on établit ce genre de modèle, il faut pouvoir en déterminer la validité en comparant ses prédictions avec l'expérience. Dans le cas de l'ADN, la plupart des expériences sont des expériences biologiques, mettant en jeu des processus complexes et l'interaction de l'ADN avec d'autres molécules, notamment des enzymes. Il n'est pas encore possible à l'heure actuelle de donner une description physique satisfaisante de ces processus biologiques et donc de les utiliser pour comparer modèle et expérience. Mais il existe un processus purement physique qui peut servir à tester la validité d'un modèle d'ADN et à en calibrer les paramètres : il s'agit de la dénaturation thermique de l'ADN qui correspond à la séparation de ses deux brins par chauffage. Nous allons donc étudier comment le modèle que nous introduisons pour la dynamique de l'ADN peut aussi permettre d'analyser cette expérience de dénaturation. Cette partie nous offrira l'occasion d'introduire des méthodes de physique statistique et de montrer comment la notion d'excitation non-linéaire peut servir à étudier les propriétés thermodynamiques d'un système.

15.1 Un modèle simple pour l'ADN

15.1.1 Structure statique de l'ADN

La découverte de la structure de l'ADN a été publiée en avril 1953 dans un article de J.D. Watson (1928-) et F.H.C. Crick (1916-) [155]. Il est intéressant de noter que cette structure a été obtenue par *modélisation* et ne résulte pas directement d'une détermination par analyse quantitative d'un diagramme de diffraction des rayons X. Watson et Crick ont bien entendu utilisé les données expérimentales de M.H.F. Wilkins (1916-) et R.E. Franklin (1920-1958), qui les avaient convaincus que la structure était hélicoïdale, mais c'est en construisant un modèle réel des groupements chimiques composant l'ADN qu'ils ont eu l'idée de la structure correcte de la molécule. C'est en particulier le modèle qui leur a suggéré l'appariement spécifique des paires de bases, maintenant appelé l'appariement de Watson-Crick.

L'acide désoxyribonucléique (ADN) est un polymère de grande taille. Le génome humain a plus d'un mètre de long quand il est totalement déroulé et que l'ADN des chromosomes est mis bout à bout. La molécule d'ADN qui constitue chacun de nos 46 chromosomes a, elle, une longueur de quelques centimètres. Cette molécule est si grande que, comme nous le verrons, elle peut être manipulée individuellement dans certaines expériences.

La figure 15.1 montre que la molécule est constituée de deux hélices qui s'enroulent l'une autour de l'autre. Les brins qui les constituent comportent une succession de nucléotides formés d'un groupement phosphate PO_4^- et d'un

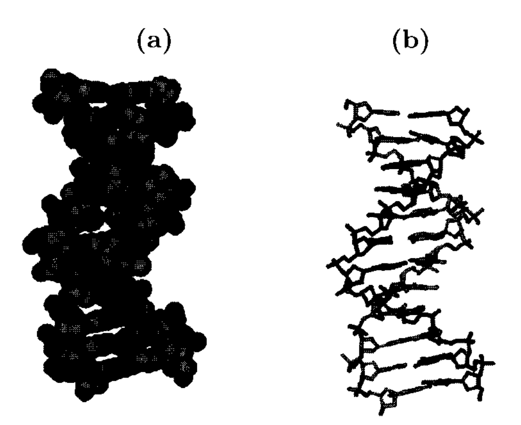


FIG. 15.1 – Représentation [153] de la structure de l'ADN à partir d'une séquence (111D) extraite de la « Protein Data Bank » (`www.rcsb.org.pdb`). (a) court segment de la double hélice dans lequel les atomes sont représentés approximativement à leur taille réelle. (b) Représentation schématique montrant le détail interne de la structure, et en particulier la structure des bases qui joignent les brins externes et qui contiennent le code génétique.

cycle organique formant un sucre (désoxi–ribose). Chaque sucre est associé à un groupement basique. Il existe 4 bases possibles : adénine, cytosine, guanine et thymine, notées A, C, G, T.

Les séquences de liaisons simples entre nucléotides successifs le long d'un brin confèrent au squelette une certaine flexibilité puisque les rotations de torsion autour de ces liaisons sont libres. Cette flexibilité est néanmoins restreinte par la configuration tridimensionnelle que prend l'ADN. Les deux chaînes polypeptidiques forment en effet deux hélices reliées par les liaisons hydrogène entre les bases qui s'apparient, c'est-à-dire entre guanine et cytosine d'une part, et entre adénine et thymine, d'autre part. C'est cet appariement particulier que Watson et Crick ont découvert en construisant un modèle de la molécule. Il a la propriété que les groupements possibles $A - T$ et $G - C$ ont des dimensions très voisines assurant ainsi une longueur quasiment constante aux « barreaux de l'échelle » qui constituent la double hélice. Cette condition permet la régularité de la structure hélicoïdale bien que la séquence des paires de bases soit variable. Le diamètre de l'hélice est d'environ 20 Å, deux bases successives sont séparées par 3,3 Å le long de l'axe, et l'hélice comporte approximativement 11 paires de bases par tour.

L'appariement de Watson-Crick implique que la double hélice possède une structure complémentaire dans les brins qui la composent. Les deux brins maintenus entrelacés contiennent chacun la même information et c'est cette structure spécifique qui est mise à profit pour la transmission du patrimoine génétique lors de la division cellulaire pour la reproduction d'un organisme.

Un facteur important de stabilisation de la structure résulte de l'empilement des bases qui constituent des groupements chimiques en forme de plateaux. Les interactions entre bases sont de deux types :

- celles liant deux bases d'une même paire sont des liaisons hydrogène ;
- celles liant les bases le long des brins sont des interactions d'empilement provenant du recouvrement entre les électrons π des cycles constituant les bases comme schématisé sur la figure 15.2.

Les deux types d'interactions entre bases peuvent être étudiés expérimentalement et ont été l'objet de recherches détaillées, notamment pour l'étude du code génétique. Enfin, il y a de plus toute une variété *d'interactions électrostatiques* qui concourent à déterminer et stabiliser la structure. Par exemple les phosphates fortement chargés se repousseraient assez fortement pour conduire à une séparation des deux brins si cette répulsion électrostatique n'était pas écrantée par la présence d'ions positifs dans une solution d'ADN ou dans le liquide intra-cellulaire.

15.1.2 Les différents processus dynamiques

Lorsqu'on examine la structure de la molécule (cf. fig. 15.1(a)), on constate que le code génétique porté par les bases est bien protégé à l'intérieur de la double hélice, ce qui est certainement favorable pour éviter qu'il soit aisément

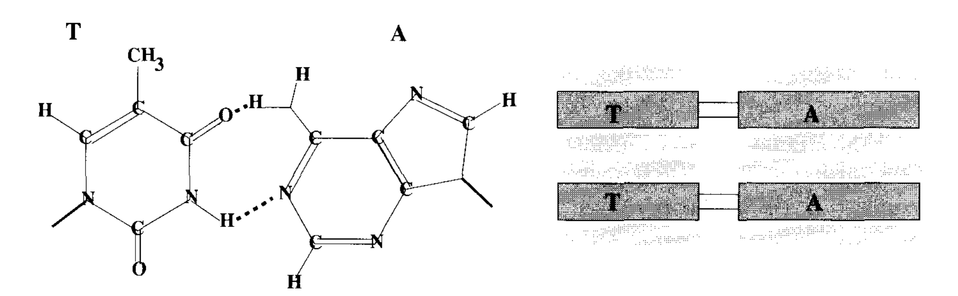


FIG. 15.2 – Formule d'une paire de bases de l'ADN ($T - A$) et représentation schématique de la géométrie correspondant à l'empilement de deux paires de bases (en gris foncé). L'interaction des électrons π (en gris clair) détermine l'énergie d'empilement. Les traits forts sur la formule correspondent aux liaisons reliant la paire de bases aux brins constituant la double hélice.

altéré, mais c'est aussi une sérieuse limitation quand on doit « lire » ce code, c'est-à-dire effectuer des réactions chimiques mettant en jeu les bases. L'accès à l'information contenue dans la double hélice d'ADN n'est possible que parce que l'hélice peut s'ouvrir localement. La structure n'est pas figée mais au contraire très dynamique. On peut distinguer différents types de mouvements : ceux qui interviennent dans la réplication et la transcription, et des fluctuations de grande amplitude, connues des biologistes sous le nom de « respiration de l'ADN » qui se produisent à tout instant. On peut y ajouter la dénaturation thermique, qui est un processus purement physique dû au chauffage de la molécule qui conduit à la destruction de la double hélice.

Réplication et Transcription

Il faut distinguer ces deux phénomènes qui impliquent tous les deux une ouverture de la double hélice pour donner accès au code génétique. La réplication recopie complètement l'information génétique en ouvrant la molécule comme une « fermeture à glissière » (cf. fig. 15.3). La transcription correspond à la lecture d'un seul gène, c'est-à-dire de quelques centaines ou milliers de paires de bases. Elle est initiée par un enzyme, l'ARN polymérase qui se fixe sur l'ADN pour synthétiser l'ARN messager. Cette activation aboutit, après une suite d'événements intermédiaires, à une dénaturation locale de la double hélice (étendue sur 10 à 20 bases), qui est l'étape limitante de la transcription. Cette ouverture se propage ensuite le long du gène, exposant successivement toutes ses bases (cf. fig. 15.3).

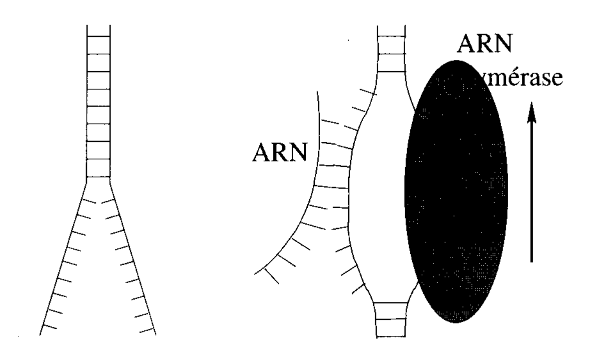


FIG. 15.3 – Représentation schématique de la réplication (à gauche) et de la transcription (à droite).

La « respiration » de l'ADN

Puisque la structure des macromolécules biologiques est stabilisée par des interactions faibles, on peut s'attendre à des fluctuations importantes, dues aux mouvements thermiques. L'existence d'états ouverts temporaires de l'ADN et de certaines doubles hélices synthétiques de polynucléotides a été démontrée à l'aide de mesures d'échanges de proton. Les paires de bases se séparent réversiblement, en exposant les protons des nucléotides à des échanges avec ceux du solvant, puis se referment. Ces états ouverts existent en grand nombre dans la double hélice, même à la température ambiante.

L'exploration expérimentale du mouvement des bases repose sur la différence de réactivité vis-à-vis d'un agent extérieur d'un groupement appartenant à une paire de bases fermée ou ouverte. La réactivité chimique des azotes cycliques et des groupes amino de l'ADN pour le formaldéhyde, celle des azotes cycliques de l'uridine et du poly(rA)-poly(rU) pour le mercure, ont été utilisées. La fraction du temps pendant laquelle les groupements réactifs sont exposés, *i.e.* la constante de dissociation des paires, est déterminée par comparaison avec la réactivité de mononucléosides isolés.

L'échange des protons des liaisons hydrogène inter-bases fournit une méthode plus directe et non perturbatrice pour étudier le mouvement des bases. Il peut être suivi par le marquage au tritium (mesuré alors par radioactivité) ou par le marquage au deutérium (mesuré par des méthodes optiques compatibles avec les cinétiques rapides). Ces techniques ont été utilisées pour étudier l'échange des protons dans des homopolymères d'ARN ou d'ADN et dans des fragments d'ADN naturel. La résonance magnétique nucléaire (RMN), qui est capable d'identifier les protons échangeables et de mesurer leur vitesse d'échange, est maintenant utilisée dans la majorité de ces études.

Au début des années 1980 des mesures par RMN [29, 73, 109] ou Raman [119, 149] ont révélé la présence de mouvements oscillants de basse fréquence et de longue durée de vie dans la molécule d'ADN. Ces mouvements,

comparés à une respiration (le terme « breathing » a été utilisé pour la première fois par P.H. Von Hippel), ont été par la suite l'objet d'études théoriques par le groupe de Prohofsky [128, 129] qui a montré que les breathers peuvent être, soit fortement localisés, soit répartis sur une zone étendue de la molécule. S'inspirant de la théorie des solitons et plus particulièrement des breathers, il avança l'idée que, puisqu'un tel mode peut être créé par un apport d'énergie très faible, les breathers pourraient être à l'origine de la localisation de l'énergie dans la molécule et conduire à la dénaturation locale. Notre objectif est de développer une explication théorique et descriptive de ces « bulles » de dénaturation et d'étudier leur dynamique.

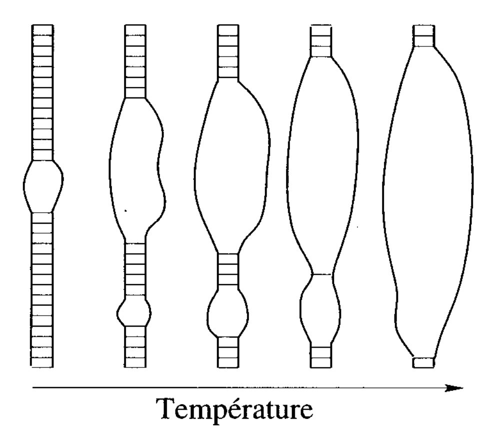


FIG. 15.4 – Représentation schématique de la dénaturation thermique.

La dénaturation thermique

Alors que les mouvements précédents étaient des mouvements naturels de l'ADN dans son environnement biologique, la dénaturation thermique est provoquée par une action extérieure. Ce processus d'ouverture peut être produit expérimentalement en modifiant le pH (pour ioniser les bases) ou en chauffant, même légèrement, une solution d'ADN, puisque l'énergie thermique du mouvement moléculaire provoque la rupture des liaisons hydrogène. La figure 15.4 représente schématiquement la dénaturation : des ouvertures locales appelées « bulles de dénaturation » apparaissent de manière localisée, grandissent et se combinent pour former des bulles plus grosses jusqu'à ce que les deux brins soient totalement séparés [136].

Cette dénaturation se produit sans rompre les liaisons covalentes formant les brins et liant les bases entre elles. Les différents facteurs responsables de la déstabilisation de la structure en double hélice créent des perturbations qui augmentent l'amplitude des fluctuations autour des valeurs moyennes des différents paramètres de l'hélice, conduisant à la rupture des ponts hydrogènes

et à l'affaiblissement des interactions d'empilement, puis au changement de conformation (état natif/état dénaturé). La stabilité de la double hélice, *i.e.* sa résistance à la dénaturation, dépend de sa séquence : les séquences riches en $G - C$ ont une plus grande résistance à la dénaturation que celles riches en $A - T$ car l'ouverture d'une paire de bases $G - C$ nécessite la rupture de trois liaisons hydrogène, alors que l'ouverture d'une paire $A - T$ ne met en jeu que deux ponts hydrogène. Dans le cas de la dénaturation thermique, on observe empiriquement que la température moyenne de dénaturation d'une chaîne donnée est effectivement liée au pourcentage de $G - C$ contenues dans la séquence.

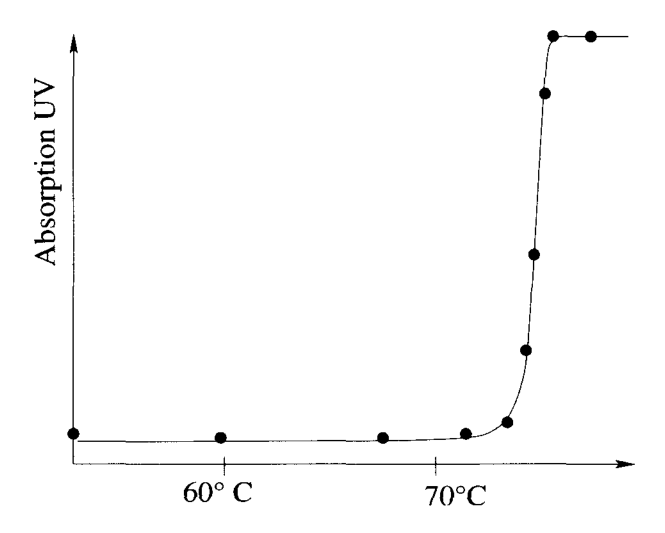


FIG. 15.5 – Absorption de la longueur d'onde 260 nm en fonction de la température dans le cas d'un ADN double brin. Figure adaptée d'une expérience effectuée [75] sur un l'ADN artificiel poly-GC, dont toutes les paires de bases sont identiques.

La méthode la plus utilisée pour étudier la dénaturation consiste à mesurer la variation d'absorption UV d'une solution diluée d'ADN lorsque l'on modifie lentement la température (cf. fig. 15.5). L'ADN bicaténaire absorbe, en effet, beaucoup moins le rayonnement de longueur d'onde 260 nm qu'une quantité équivalente d'ADN monocaténaire car la rupture des liaisons hydrogène et des interactions d'empilement entre bases modifie la distribution électronique sur les bases, qui est responsable de l'absorption du rayonnement UV. En étudiant cette absorption, tout en augmentant la température, et en normalisant le changement d'absorption de manière appropriée, il est possible de calculer la fraction de paires de bases cassées. La figure 15.5 illustre la transition que l'on peut observer pour une courte molécule d'ADN ($\sim$200 paires de bases) homogène, c'est-à-dire dont toutes les paires de bases sont identiques. Lorsque la température augmente, les paires de bases commencent à s'ouvrir en induisant un désenroulement des brins. On constate que la dénaturation survient à

une température très bien définie et se produit entièrement sur environ 1 °C. Une analyse fine montre que les ADN naturels, c'est-à-dire inhomogènes, ne se dénaturent pas globalement, mais par étapes : des segments précis de la molécule se dénaturent successivement, dans un environnement donné, pour des valeurs bien définies du facteur induisant la dénaturation (température, pH, etc.).

15.1.3 Le modèle

Pour établir un modèle, il faut d'abord déterminer quelle est l'échelle appropriée. Elle est définie par les questions auxquelles on s'intéresse. Par exemple, on pourrait se proposer d'interpréter une expérience très courante en biologie, la diffusion de molécules d'ADN dans un gel qui sert à déterminer la taille de ces molécules, car les plus courtes diffusent plus rapidement que les plus longues. Dans ce cas, un modèle décrivant la double hélice comme un unique brin déformable convient très bien. On utilise alors des modèles standards de polymères. Dans d'autres situations, si l'on s'intéresse à la dénaturation, on peut se contenter de chercher à savoir si une paire de bases est ouverte ou fermée, c'est-à-dire travailler avec un modèle à deux états 0 (fermé) ou 1 (ouvert). De tels « modèles d'Ising » ont donné des résultats intéressants pour la transition de dénaturation. Un de leurs inconvénients est que les paramètres qu'ils contiennent, qui déterminent par exemple la probabilité d'ouverture d'une paire de bases selon que la voisine est ouverte ou fermée, sont difficiles à relier à des paramètres physiques microscopiques tels que des potentiels d'interaction entre atomes. Un autre inconvénient des modèles d'Ising est qu'ils ne permettent pas de décrire la dynamique du processus d'ouverture car ils ne représentent pas les états intermédiaires entre totalement ouvert et totalement fermé. On peut au contraire penser à des modèles très détaillés de la molécule, faisant intervenir tous les atomes. C'est ce que font les études de dynamique moléculaire qui sont intéressantes pour obtenir des informations très complètes sur un court segment d'ADN. Les moyens de calculs actuels limitent l'intérêt de cette approche. En effet, le nombre de degrés de liberté est très grand : les calculs sont donc nécessairement lents. Cependant, la limitation la plus sévère vient des échelles de temps concernées qui varient dans une large gamme. Il y a des mouvements rapides des groupements les plus légers (par exemple des atomes d'hydrogène) dont les échelles de temps typiques sont de 10^{-14} à 10^{-15} s et des mouvements de grande amplitude constitués par des changements de conformation impliquant de grands groupes d'atomes (par exemple les mouvements d'ouvertures des bases) qui sont beaucoup plus lents (10^{-12} à 10^{-11} s). Dans une étude numérique de dynamique moléculaire ce sont les mouvements les plus rapides qui déterminent le pas de temps à utiliser qui doit dont être de l'ordre de 10^{-15} s. Si l'on veut étudier des processus qui s'étendent sur 1 ns il faut déjà 10^6 pas de calcul, alors que 1 ns est encore un intervalle de temps très court quand

on réalise que la durée pendant laquelle une paire de bases reste fermée entre deux mouvements de « respiration » de l'ADN est de 10 ms.

C'est pourquoi l'étude de la dynamique des macromolécules biologiques a suscité le développement de modèles qui, tout en donnant une description plus complète que les modèles d'Ising restent très simples et adaptés à la description des mouvements « lents » et de grande amplitude de ces molécules. Nous présentons ici l'un de ces modèles qui se propose de décrire la dynamique non-linéaire de l'ouverture des paires de bases sans chercher à inclure tous les atomes qui les composent. Cette approche réductive peut être vue comme une première étape vers la compréhension des phénomènes complexes dont l'ADN est le siège, et le modèle que nous introduisons ici peut être étendu par étapes successives pour décrire de plus en plus précisément la structure de l'ADN.

Le modèle le plus simple (cf. fig. 15.6) ne considère qu'*un* degré de liberté pour la paire de bases numéro n, qui sera noté y_n et qui représente l'étirement des liaisons hydrogène reliant les deux bases. C'est en quelque sorte une extension directe des modèles d'Ising dans laquelle la variable discrète $\{0, 1\}$ est remplacée par un nombre réel, qui, en principe, peut varier de $-\infty$ à $+\infty$. En fait, les grandes valeurs négatives seront interdites par l'empêchement stérique (les bases ne peuvent pas se rapprocher jusqu'à se recouvrir) provenant du potentiel d'interaction entre les bases. Les grandes valeurs positives correspondent à la séparation complète des deux brins, c'est-à-dire à la dénaturation de l'ADN. Pour chaque paire de bases, nous introduisons, outre cette variable y_n, le moment conjugué correspondant $p_n = m(\mathrm{d}y_n/\mathrm{d}t)$ qui intervient dans la dynamique du système.

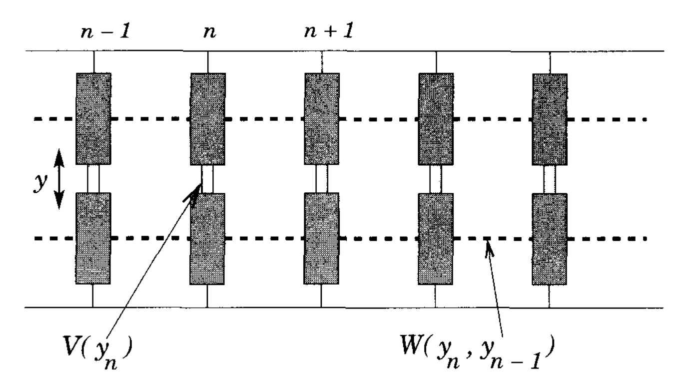


FIG. 15.6 – Représentation schématique du modèle dont l'hamiltonien est donné par l'équation (15.1).

L'hamiltonien du modèle [125] :

$$H = \sum_n \left[\frac{p_n^2}{2m} + W\left(y_n, y_{n-1}\right) + V(y_n) \right] \tag{15.1}$$

décrit les différentes contributions à l'énergie de la molécule.

Le premier terme correspond simplement à l'énergie cinétique associée au mouvement des bases, et m est la masse réduite d'une base dans le mouvement relatif des deux bases de la paire.

Le deuxième terme correspond à l'interaction d'empilement des bases. En effet, si l'une des bases sort de la pile, elle tend à entraîner ses voisines avec elle, en particulier en raison des interactions entre les électrons π qui sont situés de part et d'autre des cycles des bases (cf. fig. 15.2). Si l'on admet que le mouvement *relatif* de deux bases consécutives n'est pas trop grand, on peut limiter ce terme à son développement harmonique :

$$W\left(y_n, y_{n-1}\right) = \frac{K}{2}(y_n - y_{n-1})^2 \quad . \tag{15.2}$$

Ce n'est qu'une expression approchée du potentiel réel, et nous verrons par la suite qu'il est indispensable de tenir compte de la non-linéarité de l'interaction d'empilement si on veut obtenir des résultats en bon accord avec les expériences.

Le troisième terme de l'hamiltonien (15.1) décrit les interactions entre les deux bases formant une paire de Watson-Crick : nous choisissons le potentiel de Morse

$$V(y_n) = D\ (e^{-ay_n} - 1)^2 \quad , \tag{15.3}$$

représenté dans la figure 15.7, car il possède la forme qualitative voulue ; il comporte une forte partie répulsive pour $ay < 0$ pour reproduire l'impossibilité des paires de bases de s'interpénétrer, alors qu'à partir d'un certain étirement les bases ne doivent plus interagir de manière importante : on atteint un plateau.

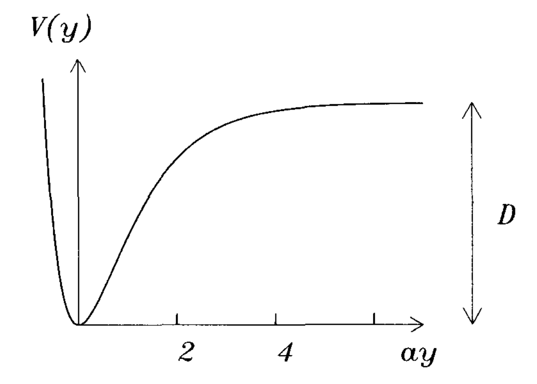


FIG. 15.7 – Le potentiel de Morse $V(y)$ tracé en fonction de la variable sans dimension ay.

Le modèle représente un homopolymère d'ADN, c'est-à-dire que les paires de bases sont toutes identiques, car nous nous intéressons plus particulièrement au rôle des effets non-linéaires dans la dynamique et la physique statistique de l'ADN. Pour étudier une séquence d'un ADN réel, il suffit d'introduire des paramètres adaptés aux différentes paires de bases de la séquence.

Le choix des paramètres est une question très difficile. Puisque les potentiels qui interviennent dans l'hamiltonien sont des potentiels entre groupements d'atomes, on pourrait penser qu'il suffit de sommer les potentiels « bien connus » de la dynamique moléculaire pour obtenir de bons potentiels effectifs pour notre hamiltonien. La réalité n'est pas aussi simple pour plusieurs raisons. D'abord les potentiels utilisés en dynamique moléculaire sont bien adaptés pour décrire les *petits mouvements* des molécules au voisinage de leur position d'équilibre. Ils sont en particulier calibrés à partir des modes de vibration observés par spectroscopie infra-rouge ou Raman. Mais le fait de bien connaître une fonction au voisinage de son minimum ne donne guère d'information sur ses valeurs loin du minimum. De plus, les potentiels effectifs que nous introduisons ne décrivent pas l'ADN en tant que molécule isolée dans l'espace. L'objectif est de la décrire dans son environnement, et donc, en particulier, de tenir compte du solvant qui l'entoure, qui lui-même contient des ions écrantant certaines interactions électrostatiques. Ainsi, par exemple, si l'on tient compte uniquement des potentiels des liaisons hydrogène connectant les bases, on arrive pour le potentiel de Morse à une valeur de D d'un ordre de grandeur trop grande. Cela provient du fait que, comme nous l'avons déjà indiqué, outre l'attraction entre bases dues aux liaisons hydrogène, il y a aussi une forte répulsion entre les brins due aux groupements PO_4^- qu'ils portent, qui n'est que partiellement écrantée par les ions qui sont dans la solution.

En pratique, les paramètres sont obtenus *a posteriori* en comparant les résultats donnés par le modèle aux résultats expérimentaux. C'est pourquoi il est important de disposer d'expériences bien contrôlées, comme la dénaturation thermique de l'ADN, pour obtenir des valeurs convenables des paramètres. Il n'en reste pas moins que les paramètres restent affectés d'une large marge d'erreur : étant donnée sa simplicité, le modèle ne peut pas prendre en compte tous les phénomènes qui interviennent dans la physique statistique et la dynamique de l'ADN réel, ce qui ne lui permet pas de fournir des résultats comparables aux expériences avec une grande précision. Il faut plutôt attendre d'un tel modèle une description qualitative des comportements de la molécule et la mise en évidence de certains comportements qui sont caractéristiques du système sans dépendre de manière sensible des paramètres.

Nous prendrons ici une énergie de dissociation $D = 0{,}03$ eV, une constante de couplage $K = 0{,}06$ eV/Å^2, une distance de variation du potentiel de Morse $a = 4{,}5$ Å^{-1}, et une masse $m = 300$ en unité de masse atomique. Le rapport entre l'énergie de couplage et l'énergie de site peut être caractérisé par $S = K/(Da^2)$, que l'on utilise comme dans le chapitre 10 sur les matériaux ferroélectriques pour distinguer entre un comportement de type

« ordre-désordre » lorsque $S \ll 1$ et un régime continu lorsque $S \gg 1$: il conduit ici à une valeur assez discrète $S = 0{,}099$.

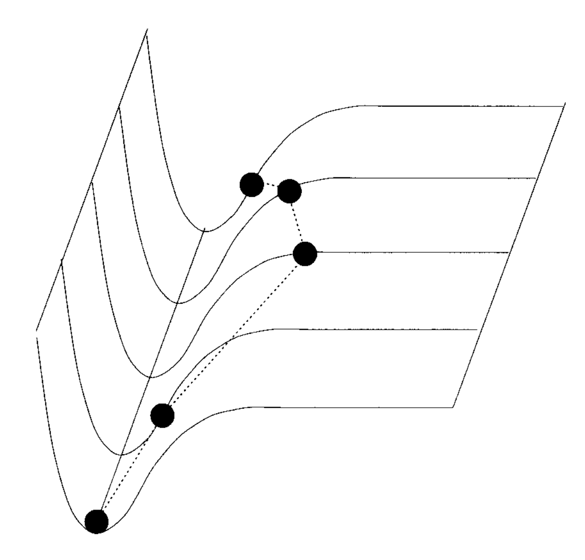


FIG. 15.8 – Représentation schématique de la dynamique du modèle (15.1). Les paires de bases sont représentées par des particules se déplaçant sur la surface du potentiel d'interaction entre les deux bases. Il existe un état fondamental dans le creux du potentiel de Morse. Mais à température non nulle, la chaîne est le siège de fluctuations importantes qui créent des « bulles de dénaturation » dans lesquelles certaines particules se déplacent sur le plateau.

La figure 15.8 représente qualitativement le comportement dynamique du modèle. Nous allons montrer qu'il peut être utilisé pour étudier différentes propriétés de l'ADN :

- La dynamique non-linéaire de l'ADN ; nous établirons que le modèle possède des solutions qui décrivent la « respiration de l'ADN » observée expérimentalement.
- La transition de phase entre l'état fermé (double hélice) et l'état ouvert (dénaturation thermique) ; dans ce cadre nous verrons que, outre les méthodes habituelles de la physique statistique, l'étude des excitations non-linéaires localisées fournit une approche complémentaire qui permet d'aller au-delà de ce que l'on peut faire analytiquement avec les méthodes usuelles.

D'une certaine manière, ce modèle rejoint celui de Krumhansl et Schrieffer [87] qui ont étudié, comme nous l'avons vu dans le chapitre 10, le rôle joué par les excitations non-linéaires de type soliton dans les transitions de phases. Ils ont pu mettre en évidence la signature des parois de domaine dans les propriétés thermodynamiques du modèle ϕ^4 unidimensionnel et dans le pic central de son spectre dynamique. Cependant, comme ce modèle ne

présente pas de transition de phase à température finie, le rôle des structures non-linéaires cohérentes dans le comportement critique, qu'il soit statique ou dynamique, n'avait pas pu être analysé.

15.2 Dynamique non-linéaire de l'ADN

15.2.1 Équations adimensionnées

Pour traiter la dynamique du système, il est intéressant de passer d'abord à des équations sans dimension qui, d'une part, seront plus simples car on aura réduit le nombre de paramètres, mais, d'autre part, permettront un meilleur contrôle des approximations qui seront nécessaires.

L'expression du potentiel (15.3) liant les bases conduit naturellement à introduire la variable sans dimension $Y = ay$ pour décrire l'étirement des liaisons hydrogène entre les bases. On obtient un hamiltonien sans dimension en divisant le hamiltonien (15.1) par D

$$H' = \frac{H}{D} = \frac{1}{2}\frac{m}{Da^2}\left(\frac{\mathrm{d}Y_n}{\mathrm{d}t}\right)^2 + \frac{1}{2}\frac{K}{Da^2}\left(Y_n - Y_{n-1}\right)^2 + \left(e^{-Y_n} - 1\right)^2 \quad . \quad (15.4)$$

On voit apparaître le paramètre sans dimension $S = K/(Da^2)$ qui mesure le rapport entre le terme de couplage et le potentiel local introduit précédemment. En faisant intervenir le temps sans dimension $t' = \sqrt{Da^2/m}\;\; t$, on peut réécrire l'énergie du modèle sous la forme adimensionnée :

$$H' = \frac{1}{2}\left(\frac{\mathrm{d}Y_n}{\mathrm{d}t'}\right)^2 + \frac{1}{2}S\left(Y_n - Y_{n-1}\right)^2 + \left(e^{-Y_n} - 1\right)^2 \quad , \quad (15.5)$$

qui montre que le modèle n'est en fait caractérisé que par le paramètre S. Les valeurs précisées précédemment donnent $S = 0{,}099$, ce qui indique que le couplage entre la dynamique des bases consécutives est faible.

Pour obtenir une forme hamiltonienne correcte, on peut introduire les moments conjugués des variables Y_n dont les expressions sont $P_n = \mathrm{d}Y_n/\mathrm{d}t'$.

Dans la suite, pour alléger les notations, nous omettrons les $'$ sur l'hamiltonien et le temps, mais chaque fois que nous utiliserons les variables adimensionnées Y_n, il sera sous-entendu que tous les paramètres intervenant dans les expressions seront adimensionnés.

Les équations du mouvement que l'on obtient à partir du hamiltonien (15.5) sont :

$$\frac{\mathrm{d}^2 Y_n}{\mathrm{d}t^2} = S(Y_{n+1} + Y_{n-1} - 2Y_n) + 2\,e^{-Y_n}\left(e^{-Y_n} - 1\right) \quad . \quad (15.6)$$

15.2.2 Solution non-linéaire des équations du mouvement

On parvient ainsi à un ensemble d'équations différentielles non-linéaires couplées et, comme nous l'avons déjà noté à plusieurs reprises, de tels systèmes sont rarement solubles exactement. C'est encore le cas ici, et nous allons devoir faire des approximations pour le résoudre. On peut *écarter a priori* deux types d'approximations :

- la linéarisation qui négligerait une caractéristique essentielle du système : la non-linéarité du potentiel de Morse ;
- l'approximation des milieux continus qui est difficilement acceptable pour $S \approx 0{,}1$.

Si l'on s'intéresse à la dynamique du système, on ne peut cependant pas obtenir une solution en gardant l'expression complète du potentiel de Morse. Une approche possible est de faire un développement de moyenne amplitude du terme non-linéaire. Pour mesurer l'ordre de grandeur des différents termes, on introduit la variable ϕ_n définie par :

$$Y_n = \varepsilon\phi_n \qquad \text{avec} \qquad \varepsilon \ll 1 \quad . \tag{15.7}$$

En conservant les deux premiers termes non-linéaires du développement, le système d'équations (15.6) devient :

$$\frac{\mathrm{d}^2\phi_n}{\mathrm{d}t^2} = S(\phi_{n+1} + \phi_{n-1} - 2\phi_n) - 2\Big(\phi_n - \frac{3}{2}\varepsilon\phi_n^2 + \frac{7}{6}\varepsilon^2\phi_n^3\Big) + \mathcal{O}(\varepsilon^3) \quad . \tag{15.8}$$

On retrouve des équations qui ressemblent à celles que nous avions étudiées quand nous cherchions les ondes non-linéaires dans la chaîne de pendules (cf. chap. 3). Compte tenu de la faible valeur de S, l'approximation des milieux continus ne peut être utilisée ici. On peut néanmoins s'inspirer des résultats obtenus sur la chaîne de pendules pour chercher une solution de la forme

$$\phi_n(t) = \left(F_n e^{i\theta_n} + F_n^\star e^{-i\theta_n}\right) + \varepsilon\left(G_n + H_n e^{2i\theta_n} + H_n^\star e^{-2i\theta_n}\right) + \mathcal{O}(\varepsilon^2) \quad , \tag{15.9}$$

avec $\theta_n = qn - \omega t$. L'idée est que, comme dans le cas de la chaîne de pendules, nous allons chercher des solutions sous la forme d'une onde « porteuse » modulée en amplitude et, compte tenu de la présence de termes non-linéaires dans les équations, nous devrons introduire les premières harmoniques de l'onde, ce qui conduit par combinaison des fréquences, aux termes en $\exp(\pm 2i\theta_n)$ et au terme ne comportant plus de facteur exponentiel. Nous allons admettre que les facteurs d'amplitude F, G, H, varient lentement dans le temps et l'espace, c'est-à-dire que nous ferons, pour eux, une approximation des milieux continus et un développement en échelles multiples. Cette méthode est connue sous le nom d'approximation semi-discrète [132] car elle conserve une onde porteuse qui, comme nous allons le vérifier, obéit à la relation de dispersion du réseau discret, et dont seule la variation d'amplitude est traitée à la limite continue.

Dans cette approximation F, G, H sont supposées indépendantes des variables « rapides » t et n et leur variations spatio-temporelles ne sont déterminées que par les variables « lentes » $X_1 = \varepsilon x$, $X_2 = \varepsilon^2 x$, $T_1 = \varepsilon t$, $T_2 = \varepsilon^2 t$. Une approximation des milieux continus peut alors être faite pour ces fonctions, ce qui remplace par exemple $F_n(t)$ par $F(X_1, X_2, T_1, T_2)$. $F_{n\pm1}$ est obtenu à l'ordre ε^2 par un développement de Taylor

$$F_{n\pm1} = F \pm \varepsilon \frac{\partial F}{\partial X_1} \pm \varepsilon^2 \frac{\partial F}{\partial X_2} + \frac{\varepsilon^2}{2} \frac{\partial^2 F}{\partial X_1^2} + \mathcal{O}(\varepsilon^3) \tag{15.10}$$

et la dérivée temporelle de F_n est donnée par

$$\frac{\partial F_n}{\partial t} = \varepsilon \frac{\partial F}{\partial T_1} + \varepsilon^2 \frac{\partial F}{\partial T_2} + \mathcal{O}(\varepsilon^3) \quad . \tag{15.11}$$

On écrit des équations similaires pour H et G puis on les utilise en reportant l'expression (15.9) dans les équations (15.8). Le calcul est fastidieux mais facile. On examine ensuite successivement les différents ordres en ε pour lesquels on doit annuler les termes en $\exp(\pm i\theta_n)$ $\exp(\pm 2i\theta_n)$ et les termes sans la dépendance exponentielle.

À l'ordre ε^0, l'annulation des termes en $\exp(\pm i\theta_n)$ donne une équation linéaire en F_n qui est satisfaite si ω et q sont liés par la relation de dispersion :

$$\omega^2 = 2 + 4S \sin^2 \frac{q}{2} \quad . \tag{15.12}$$

C'est la relation de dispersion des ondes linéaires dans le système décrit par les équations (15.8). On constate qu'il s'agit bien de la relation de dispersion du modèle *discret*, et c'est ce qui fait l'intérêt de cette méthode semi-discrète par rapport au développement en échelles multiples de l'équation continue comme nous l'avions fait au chapitre 3.

À l'ordre ε^1, l'annulation des termes en $\exp(i\theta_n)$ donne la relation

$$\frac{\partial F}{\partial T_1} + v_g \frac{\partial F}{\partial X_1} = 0 \qquad \text{avec} \qquad v_g = \frac{S \sin q}{\omega} \quad , \tag{15.13}$$

qui correspond à la vitesse de groupe $\mathrm{d}\omega/\mathrm{d}q$ des ondes ayant la relation de dispersion (15.12).

Les termes ne comportant pas de dépendance exponentielle et ceux en $\exp(2i\theta_n)$ donnent à cet ordre :

$$G = 3F F^\star \qquad \text{et} \qquad H = -\frac{1}{2} \frac{F^2}{1 + (8S/3) \sin^4 (q/2)} \quad . \tag{15.14}$$

L'équation la plus intéressante est fournie par les termes en $\exp(i\theta_n)$ à l'ordre ε^2. Si on l'écrit dans le repère mobile à la vitesse v_g elle se réduit tout simplement à l'équation NLS

$$i \frac{\partial F}{\partial \tau_2} + P \frac{\partial^2 F}{\partial \xi_1^2} + Q|F|^2 F = 0 \quad . \tag{15.15}$$

Les coefficients

$$P = \frac{S\omega^2 \cos q - S^2 \sin^2 q}{2\omega^3} \quad \text{et} \quad Q = \frac{1}{2\omega}\left(11 - \frac{9}{3 + 8S\sin^4(q/2)}\right) \qquad (15.16)$$

dépendent du vecteur d'onde q de l'onde porteuse comme représenté sur la figure 15.9. On constate que le produit PQ est positif dans tout le domaine des

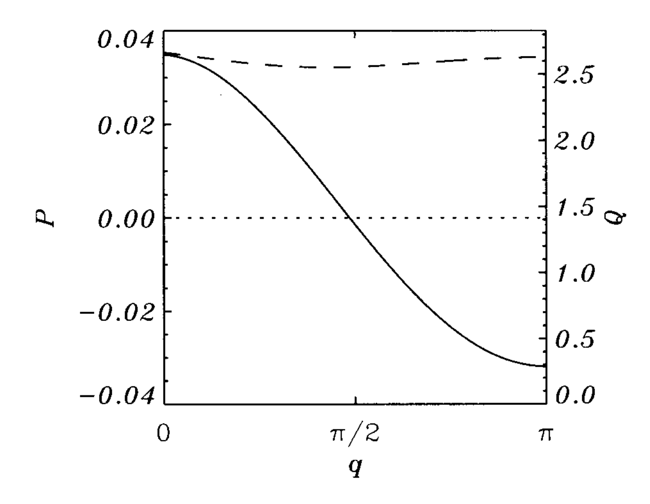


FIG. 15.9 – Variation des paramètres P (trait plein) et Q (trait interrompu) de l'équation NLS (15.15) décrivant la dynamique non-linéaire de l'ADN en fonction du vecteur d'onde q de l'onde porteuse.

vecteurs d'ondes inférieurs à $\pi/2$, et on peut donc s'attendre à des solutions localisées spatialement pour toutes les ondes porteuses de faibles vecteurs d'onde.

En utilisant l'expression de la solution soliton de l'équation NLS pour obtenir F, en calculant les expressions de G et H qui en dérivent par (15.14) puis en reportant dans l'expression de $Y_n = \varepsilon\phi_n$ on parvient à

$$\begin{aligned} Y_n(t) = 2a\,\mathrm{sech}\left[a\sqrt{\frac{Q}{2P}}(n - v_g t - u_e t)\right]\cos(q'n - \omega' t) \\ + a^2\,\mathrm{sech}^2\left[a\sqrt{\frac{Q}{2P}}(n - v_g t - u_e t)\right]\left(3 - \frac{1}{2}\frac{\cos[2(q'n - \omega' t)]}{1 + (8S/3)\sin^4(q/2)}\right), \end{aligned} \qquad (15.17)$$

où a et u_e sont les deux paramètres qui caractérisent la solution de l'équation NLS. Le facteur ε qui avait été introduit pour suivre les différents ordres du développement mais n'a pas de sens physique, a été incorporé dans l'amplitude a du soliton. La quantité u_e est la vitesse de l'enveloppe de la solution

soliton de l'équation NLS, dans laquelle on a également incorporé le facteur ε qui figurait dans la variable spatiale ξ_1 de l'équation NLS (15.15). Les paramètres ω' et q' correspondent à la fréquence et au vecteur d'onde de l'onde porteuse qui ont été corrigés par le facteur de phase de la solution soliton de l'équation NLS. Ils ont pour expression :

$$\omega' = \omega + \frac{v_g u_e}{2P} + \frac{u_e^2}{4P} - \frac{Qa^2}{2} \quad \text{et} \quad q' = q + \frac{u_e}{2P} \quad . \tag{15.18}$$

Cette solution n'est qu'une solution approchée pour la dynamique du modèle d'ADN, mais la simulation numérique montre qu'elle est satisfaisante et stable *pourvu que la fréquence ω' n'appartienne pas à la bande de fréquences des modes linéaires*, donnée par la relation de dispersion (15.12). Cette condition est facile à comprendre : si le mode localisé oscille à une fréquence permise pour les ondes non localisées, il va se coupler à celles-ci et avoir tendance à perdre son énergie par rayonnement d'ondes non localisées de faible amplitude. Comme le montre l'expression (15.18) de ω', cette condition est d'autant plus facile à satisfaire que l'on considère des porteuses de faibles vecteurs d'onde pour lesquelles ω est au voisinage du bas de la bande des fréquences permises $\omega = \sqrt{2}$. L'effet de la non-linéarité est en effet d'abaisser la fréquence de vibration (terme $-Qa^2/2$ dans l'expression de ω'), ce qui l'amène donc plus facilement dans la bande interdite $\omega < \sqrt{2}$. L'expression (15.18) indique en outre que la condition de stabilité est plus facile à remplir pour les solitons qui ont une faible vitesse d'enveloppe u_e, ce que confirment des simulations numériques.

L'existence d'une solution localisée qualitativement semblable aux fluctuations d'ouverture de l'ADN qui sont observées expérimentalement, est intéressante mais elle ne suffit pas à garantir l'importance physique de cette solution. Pour qu'elle existe dans l'ADN il faut qu'elle puisse être créée naturellement. Nous avons déjà signalé un des aspects des solitons qui fait leur intérêt : leur caractère « attracteur » pour une condition initiale ne correspondant pas à la solution exacte, leur permet d'être générés par une grande variété d'excitations. La solution non-linéaire que nous avons obtenue pour le modèle d'ADN n'est pas un soliton exact, mais elle présente néanmoins cette propriété d'être facilement créée dans la molécule. Elle peut même se former spontanément à partir des fluctuations thermiques comme le montrent les simulations numériques du modèle placé en contact avec un bain thermique.

15.2.3 Dynamique du modèle en contact avec un bain thermique

Une approche possible pour étudier la dynamique du modèle d'ADN consiste à utiliser la simulation numérique des équations du mouvement (15.6). Il est facile de simuler les équations non-linéaires sans approximation, mais ce n'est pas suffisant si l'on s'intéresse à la situation physique de la molécule,

car on ne peut pas ignorer les fluctuations thermiques. Il faut ajouter aux équations (15.6) l'influence d'un thermostat qui maintient la molécule à la température T à laquelle on s'intéresse.

Pour présenter la méthode, considérons le cas simple d'un atome de masse m, mobile dans la direction x, appartenant à une molécule placée dans un solvant à température T. L'atome est soumis à un potentiel $V(x)$ qui décrit son interaction avec le reste de la molécule. Les molécules du solvant, en agitation incessante, exercent sur l'atome une force aléatoire $F(t)$ de sorte que son équation de mouvement est :

$$m\frac{\mathrm{d}^2 x}{\mathrm{d}t^2} = -\frac{\partial V}{\partial x} + F(t) \quad . \tag{15.19}$$

La force aléatoire peut être divisée en deux contributions. Elle comporte une partie, que nous noterons $-\gamma \mathrm{d}x/\mathrm{d}t$ qui a un effet moyen systématiquement opposé à la vitesse de déplacement de l'atome. On peut comprendre l'origine de ce terme en pensant que l'atome en mouvement a une plus grande probabilité de rencontrer les molécules de solvant sur son « côté avant » car il va à leur rencontre, que sur son « côté arrière » (il est facile de s'en convaincre en pensant à ce qui se passe quand on fait de la bicyclette sous la pluie ! On est mouillé devant et presque sec derrière. À l'échelle moléculaire le phénomène est le même). Quand on a soustrait la composante systématique de $F(t)$, il reste une composante purement aléatoire, de moyenne statistique nulle $f(t)$. L'équation du mouvement de l'atome s'écrit donc :

$$m\frac{\mathrm{d}^2 x}{\mathrm{d}t^2} = -\frac{\partial V}{\partial x} - \gamma\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t} + f(t) \quad . \tag{15.20}$$

Pour simuler un système en contact avec un bain thermique, on fait souvent l'hypothèse que l'échelle de temps des fluctuations aléatoires du bain thermique est négligeable vis-à-vis des échelles de temps caractéristiques du système, ce qui revient à supposer que la corrélation temporelle de la force aléatoire $f(t)$ est nulle. La fonction de corrélation de $f(t)$ est alors de la forme $\langle f(t)f(t')\rangle = q\delta(t-t')$, où q est une constante.

La physique statistique du système thermalisé montre que les deux composantes de la force $F(t)$ ne sont pas indépendantes. Elles sont liées par le théorème fluctuation-dissipation [131] qui impose $q = 2k_B T\gamma/m$, où k_B est la constante de Boltzmann. Pour simuler le système thermalisé, une méthode possible consiste donc à résoudre une équation analogue à l'équation (15.20), connue sous le nom d'équation de Langevin. Le principe est simple car, une fois que l'on a choisi le paramètre γ qui détermine l'intensité du couplage entre le système que l'on étudie et le thermostat, on peut simuler les équations avec une méthode numérique standard pour le traitement des équations différentielles [127, 15]. On génère la force $f(t)$ en utilisant un générateur de nombres aléatoires gaussien. Pour vérifier correctement la relation imposée par le théorème fluctuation-dissipation quand on travaille avec un pas de temps discret

Δt, condition imposée par la résolution numérique, il faut choisir pour variance de la distribution des valeurs de $f(t)$ la quantité $\sqrt{2k_BT\gamma/(m\Delta t)}$ [62].

La méthode utilisant l'équation de Langevin pour simuler un système thermalisé est la plus simple conceptuellement, mais ce n'est pas la plus efficace. Une méthode qui permet d'obtenir exactement les propriétés d'équilibre d'un système en contact avec un thermostat a été développée ; elle est connue sous le nom de méthode de Nosé. L'approche initialement proposée par Nosé a ensuite été améliorée pour assurer une meilleure exploration de l'espace des phases du système et elle fournit une méthode de calcul très intéressante pour la simulation d'un système thermalisé [103].

L'idée de la méthode de Nosé est de définir un système hamiltonien étendu par rapport au système physique, et qui comporte une ou plusieurs paires de variables complémentaires correspondant au thermostat. On peut la schématiser de la manière suivante pour un système physique décrit par les variables x_i et les moments conjugués p_i :

Système physique $x_i,\, p_i = m_i \frac{\mathrm{d}x_i}{\mathrm{d}t}$	$\Leftrightarrow$	Thermostat 1 $\eta_1,\, p_{\eta 1},\, Q_1$	$\Leftrightarrow$	Thermostat 2 $\eta_2,\, p_{\eta 2},\, Q_2$	$\cdots$	Thermostat M $\eta_M,\, p_{\eta M},\, Q_M$

L'hamiltonien étendu s'écrit :

$$H_1 = H + \sum_{j=1}^{M} \frac{p_{\eta j}^2}{2Q_j} + Nk_BT\eta_1 + \sum_{j=2}^{M} k_BT\eta_j \quad , \tag{15.21}$$

où η_j sont les variables caractérisant les thermostats et $p_{\eta j}$ leurs moments conjugués. Les équations du mouvement qui résultent de cet hamiltonien sont

$$\frac{\mathrm{d}x_i}{\mathrm{d}t} = \frac{p_i}{m_i} \quad , \qquad \frac{\mathrm{d}p_i}{\mathrm{d}t} = -\frac{\partial V}{\partial x_i} - p_i\,\frac{p_{\eta 1}}{Q_1} \quad , \tag{15.22}$$

$$\frac{\mathrm{d}\eta_1}{\mathrm{d}t} = \frac{p_{\eta 1}}{Q_1} \quad , \qquad \frac{\mathrm{d}p_{\eta 1}}{\mathrm{d}t} = \left[\sum_{i=1}^{N} \frac{p_i^2}{m_i} - Nk_BT\right] - p_{\eta 1}\,\frac{p_{\eta 2}}{Q_2} \quad , \tag{15.23}$$

$$\frac{\mathrm{d}\eta_j}{\mathrm{d}t} = \frac{p_{\eta j}}{Q_j} \quad , \qquad \frac{\mathrm{d}p_{\eta j}}{\mathrm{d}t} = \left[\frac{p_{\eta j-1}^2}{Q_{j-1}} - k_BT\right] - p_{\eta j}\,\frac{p_{\eta j+1}}{Q_{j+1}} \quad , \tag{15.24}$$

$$\frac{\mathrm{d}\eta_M}{\mathrm{d}t} = \frac{p_{\eta M}}{Q_M} \quad , \qquad \frac{\mathrm{d}p_{\eta M}}{\mathrm{d}t} = \left[\frac{p_{\eta M-1}^2}{Q_{M-1}} - k_BT\right] \quad . \tag{15.25}$$

Les paramètres Q_j, qui jouent le rôle de « masses » pour les thermostats déterminent l'aptitude des thermostats à répondre rapidement aux variations de température du système. L'objectif est de contrôler la température sans interdire totalement ses fluctuations, qui existent toujours dans un système physique. Leurs valeurs optimales sont $Q_1 = Nk_BT/\omega_M^2$, $Q_j = k_BT/\omega_M^2$, où

ω_M est la pulsation la plus élevée dans la dynamique du système physique que l'on étudie (pulsation du maximum de la bande des modes non localisés pour le modèle d'ADN par exemple). La méthode donne de très bons résultats même lorsqu'on utilise un petit nombre de thermostats ($M = 5$ par exemple).

L'équation (15.22) montre que, comme celle de Langevin, la méthode de Nosé introduit dans l'équation du mouvement un terme proportionnel à la vitesse (ou ici à la quantité de mouvement), mais, au lieu d'être multiplié par un coefficient d'amortissement γ fixe, il intervient avec un amortissement effectif $p_{\eta 1}/Q_1$ qui est lui–même une variable dynamique du système. Son équation d'évolution assure que la méthode donne exactement les valeurs d'équilibre d'un système canonique.

Lorsqu'on simule les équations de mouvement (15.6) du modèle d'ADN par la méthode de Nosé avec les équations (15.22) on peut observer des excitations qui tendent spontanément à se créer dans la molécule sous l'influence des fluctuations thermiques. La figure 15.10 donne un exemple pour une température de 340 K.

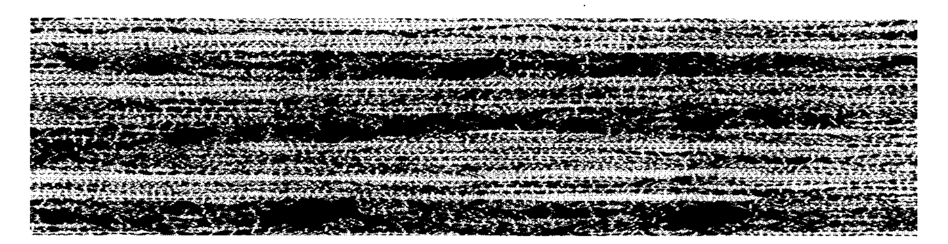


FIG. 15.10 – Dynamique du modèle d'ADN d'hamiltonien (15.1) en contact avec un bain thermique à la température de 340 K. L'amplitude du mouvement de chaque paire de bases est représentée par une échelle de gris allant du blanc (paire de bases totalement fermée) au noir (paire de bases ouverte). L'axe vertical s'étend le long de la molécule et correspond à l'indice n de la paire de bases ($1 \leq n \leq 256$) et l'axe horizontal correspond au temps.

Dans cette situation où l'ADN est un peu en-dessous de sa température de dénaturation thermique, la figure montre des taches noires associées à l'ouverture simultanée d'un ensemble de paires de bases voisines, correspondant aux « bulles de dénaturation thermique » schématisées sur la figure 15.4. On observe également des lignes pointillées qui traduisent une oscillation de grande amplitude dans laquelle quelques paires de bases s'ouvrent et se referment de manière périodique. Ces lignes pointillées correspondent aux modes de respiration de l'ADN dont nous avons parlé précédemment. Leur forme analytique est approximativement donnée par l'équation (15.17) mais le couplage avec le bain thermique perturbe légèrement la régularité du mouvement correspondant à cette solution théorique. On note cependant que ces modes de respiration persistent pendant un grand nombre de périodes. La densité d'énergie

au niveau d'un de ces modes est plus grande que dans les zones plus claires de la figure. On observe ainsi une rupture temporaire de l'équipartition de l'énergie dans la molécule d'ADN. Quand on étudie le système sur un temps beaucoup plus long, on retrouve cette équipartition car un mode localisé dans une région tend à disparaître sous l'effet des perturbations du bain thermique, tandis qu'un autre est généré ailleurs, ce qui indique que la thermodynamique n'est bien entendu pas remise en cause par la physique non-linéaire. Cependant, la localisation d'énergie par effet non-linéaire conduit à des propriétés dynamiques très différentes de celles que l'on observe dans un système linéaire.

La simulation suggère aussi l'importance des modes localisés comme précurseurs des ouvertures locales de la molécule. Ils interviennent dans la thermodynamique de l'ADN, mais, comme nous allons le voir, il y a également une autre excitation non-linéaire du système qui joue un rôle crucial pour l'analyse thermodynamique du modèle d'ADN.

15.3 Physique statistique de la dénaturation thermique

La physique statistique du modèle d'ADN peut être traitée par les méthodes standards. Pour ce système unidimensionnel, la méthode de choix est encore la méthode de l'intégrale de transfert, introduite au chapitre 10 dans le cadre du modèle ϕ^4. Nous avions vu que toute l'information était contenue dans les fonctions propres ϕ_n et les valeurs propres $\exp(-\beta\varepsilon_n)$ de l'opérateur de transfert suivant :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}y \; e^{-\beta\left[V(x)+V(y)+K(x-y)^2\right]/2} \; \phi_n(y) = e^{-\beta\varepsilon_n} \; \phi_n(x) \quad , \tag{15.26}$$

(avec $\beta = 1/(k_B T)$) que nous avons écrit ici avec les variables dimensionnées.

Comme nous l'avions vu, l'énergie libre par site est, dans la limite thermodynamique, directement donnée par la valeur ε_0 correspondant à la plus grande valeur propre de l'équation (15.26), en n'omettant cependant pas le terme non singulier provenant de l'intégration sur les quantités de mouvement. On a ainsi :

$$f = \varepsilon_0 - \frac{1}{2\beta} \ln\left(\frac{2\pi m}{\beta}\right) \quad . \tag{15.27}$$

La fonction propre normalisée ϕ_0 associée à la valeur propre $\exp(-\beta\varepsilon_0)$ fournit le facteur de pondération pour le calcul de la valeur moyenne de l'étirement des paires de bases $\langle y \rangle$, c'est-à-dire l'écartement moyen entre les deux brins de l'ADN, qui est le paramètre d'ordre de la transition de dénaturation thermique, donné par :

$$\sigma = \langle y \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}y \; y \; |\phi_0|^2 \quad . \tag{15.28}$$

En utilisant l'approximation des milieux continus valable [66] dans la fenêtre de températures $D \ll k_B T \ll K/a^2$, nous avons montré au chapitre 10 que l'équation intégrale (15.26) peut être réduite à l'équation de Schrödinger

$$\left[-\frac{1}{2\beta^2 K}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}y^2} + D(e^{-ay}-1)^2\right]\phi_n(y) = e_n\ \phi_n(y) \quad , \qquad (15.29)$$

où l'on a introduit $e_n = \varepsilon_n + \ln(2\pi/\beta K)/2\beta$. L'étude de la physique statistique de l'ADN par la méthode de l'intégrale de transfert [125] se réduit donc à la résolution d'un problème de mécanique quantique pour une particule dans un espace de dimension 1.

15.3.1 Étude qualitative de la transition de phase

La résolution exacte de l'équation (15.29) est possible avec le potentiel de Morse, mais pour éviter que les aspects techniques masquent la réalité physique, il est intéressant de traiter le cas d'un potentiel qui a la même forme qualitative que le potentiel de Morse mais qui conduit à des calculs très simples. Considérons le potentiel $V'(y)$, représenté sur la figure (15.11),

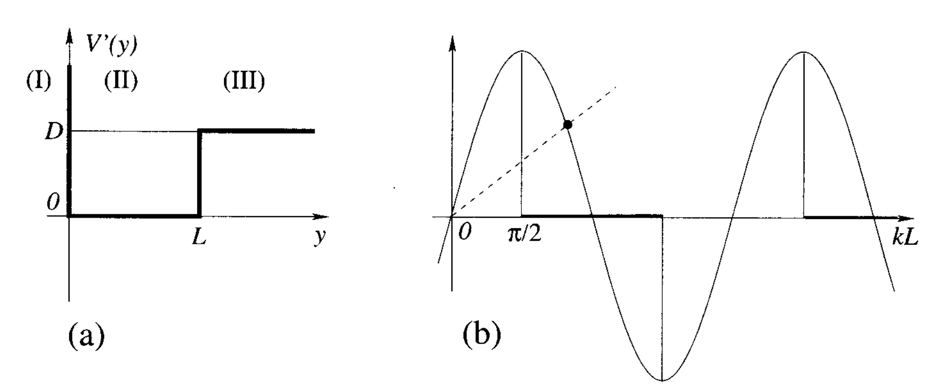


FIG. 15.11 – (a) Potentiel $V'(y)$ (trait fort) utilisé pour une étude qualitative de la thermodynamique statistique de l'ADN. (b) Recherche des valeurs de kL donnant un état lié dans le potentiel $V'(y)$. Les valeurs permises par la condition $\cos(kL) < 0$ sont indiquées par le trait épais. La solution est donnée par l'intersection de la droite de pente $\sqrt{\alpha/D}/L$ et de la courbe $\sin(kL)$.

correspondant à un puits de profondeur finie D, de largeur L,

$$V'(y) = \begin{cases} D & \text{pour } y \geq L \\ 0 & \text{pour } 0 < y < L \\ +\infty & \text{pour } y \leq 0 \quad . \end{cases} \qquad (15.30)$$

Il est qualitativement analogue au potentiel de Morse représenté sur la figure 15.7, si l'on assimile $1/a$ à la largeur du puits L. L'équation de

Schrödinger

$$-\alpha\frac{\mathrm{d}^2\phi}{\mathrm{d}y} + V'(y)\ \phi(y) = e\ \phi(y) \quad , \qquad (15.31)$$

que l'on doit résoudre pour obtenir les fonctions propres de l'opérateur de transfert pour ce modèle simplifié, dans laquelle on a posé $\alpha = 1/(2\beta^2 K)$, est un exemple classique des cours de mécanique quantique. Les seules solutions non identiquement nulles sont obtenues pour $e > 0$ et nous allons chercher les états liés, qui donnent des fonctions ϕ normalisables et sont obtenus pour $e < D$. Dans le domaine (I), on a nécessairement $\phi = 0$ puisque le potentiel est infini. Dans le domaine (II) où $V' = 0$, la solution est de la forme

$$\phi(y) = A\sin y + B\cos y \quad , \qquad (15.32)$$

avec $k = \sqrt{e/\alpha}$. La continuité de ϕ en $y = 0$ impose $B = 0$. Dans le domaine (III) où $V'(y) = D$, la solution pour $e < D$ est de la forme

$$\phi(y) = Ce^{-\rho y} + Ee^{\rho y} \quad , \qquad (15.33)$$

avec $\rho = \sqrt{(D-e)/\alpha}$. Par définition d'un état lié, ϕ doit tendre vers 0 pour $y \to \infty$ de sorte que $E = 0$.

Les conditions de continuité de ϕ et de sa dérivée en $y = L$ conduisent aux relations :

$$A\sin(kL) = Ce^{-\rho L} \qquad (15.34)$$

$$Ak\cos(kL) = -\rho\ Ce^{-\rho L} \quad . \qquad (15.35)$$

Pour que l'état lié existe, il faut donc que k vérifie la condition $\cos(kL)/\sin(kL) = -\rho/k$ avec $\cos(kL) < 0$. On peut encore écrire cette relation sous la forme :

$$1 + \frac{\cos^2(kL)}{\sin^2(kL)} = \frac{1}{\sin^2(kL)} = 1 + \frac{\rho^2}{k^2} = \frac{e}{D} \quad \text{avec} \quad \cos(kL) < 0 \quad . \qquad (15.36)$$

On arrive donc à une équation implicite donnant kL (donc e),

$$\sin(kL) = \sqrt{\frac{e}{D}} = \pm\frac{1}{L}\sqrt{\frac{\alpha}{D}}\quad kL \quad , \qquad (15.37)$$

dont la solution est obtenue par l'intersection de la droite de pente $(1/L)\sqrt{\alpha/D}$ avec la courbe $\sin(kL)$, vérifiant en outre la condition $\cos(kL) < 0$. La figure 15.11 montre que la solution n'existe que si

$$\frac{1}{L}\sqrt{\frac{\alpha}{D}} < \frac{2}{\pi} \quad \text{soit} \quad T < \frac{2L\sqrt{2KD}}{\pi k_B} = T_m \quad , \qquad (15.38)$$

en tenant compte de l'expression de α.

Ainsi le calcul montre que l'opérateur de transfert ne possède un état fondamental localisé que si la température est inférieure à une valeur critique T_m donnée par l'équation (15.38). En-dessous de cette température, la fonction propre ϕ_0 de l'opérateur de transfert est normalisable et le calcul du paramètre d'ordre σ donne un résultat fini. Au contraire, pour $T > T_m$, l'état fondamental ϕ_0 n'est plus localisé et la valeur moyenne de la distance entre les bases d'une paire diverge. La température T_m apparaît donc comme la température à laquelle les deux brins de l'ADN se séparent. Si l'on tient compte de la correspondance approchée $1/L \sim a$ entre le potentiel $V'(y)$ et le potentiel de Morse, on obtient pour le modèle d'ADN :

$$T_m = \frac{2\sqrt{2KD}}{\pi a k_B} \quad . \tag{15.39}$$

Ce calcul avec un potentiel approché indique que le modèle simplifié d'ADN que nous avons introduit possède une transition de phase entre l'état double hélice pour $T < T_m$ et l'état dénaturé pour $T > T_m$. C'est un résultat intéressant puisque c'est effectivement ce que l'on observe pour l'ADN, mais cela peut sembler surprenant puisque le modèle est unidimensionnel et ne possède que des interactions entre plus proches voisins, donc à courte portée. Or un « théorème » souvent mentionné en physique statistique interdit les transitions de phases à une dimension dans les systèmes sans interactions à longue portée. En réalité il ne s'applique pas ici. Le théorème de Gursey [65], démontré par Van Hove [150], puis étendu par Ruelle [134], s'applique aux systèmes ne contenant que des interactions de paires alors que le modèle que nous étudions possède le potentiel de Morse $V(y_n)$ qui ne concerne qu'une variable y_n. Quant à l'argument classique de Landau [90], fondé sur la possibilité qu'a le système de se diviser en domaines séparés par des interfaces qui s'opposent à l'ordre à basse température, il concerne les systèmes avec un potentiel de substrat, comme par exemple le modèle ϕ^4, mais il ne s'applique pas non plus ici car l'énergie de la paroi de domaine séparant une zone ouverte et une zone fermée de l'ADN est infinie, comme nous le verrons par la suite.

Pour conclure avec certitude sur l'existence de la transition dans le modèle d'ADN, il faut cependant traiter le modèle complet, c'est-à-dire résoudre l'équation de Schrödinger (15.29) avec le potentiel de Morse. Avant de présenter ce résultat, on peut noter que la température de transition T_m n'aurait pas pu être estimée par une simple analyse dimensionnelle dont le principe est de construire une énergie $k_B T_m$ à partir des paramètres du modèle, D, K, a et m, dont les dimensions sont respectivement :

$$[D] = E \tag{15.40}$$

$$[K] = E.L^{-2} \tag{15.41}$$

$$[a] = L^{-1} \tag{15.42}$$

$$[m] = E.T^2.L^{-2} \quad , \tag{15.43}$$

où E est une énergie, L une longueur et T un temps. D'après le théorème π de Buckingham, il est possible de chercher l'expression de la température de transition sous la forme en loi de puissance

$$k_B T_m = c\, D^\xi K^\beta a^\gamma m^\delta \quad , \tag{15.44}$$

où c est facteur numérique d'ordre 1. Cette expression conduit au système suivant après identifications :

$$2\delta = 0 \quad , \qquad \xi + \beta + \delta = 1 \quad \text{et} \qquad -2\beta - \gamma - 2\delta = 0 \quad . \tag{15.45}$$

Ces arguments purement dimensionnels donnent une température de transition qui suit la loi

$$k_B T_m = c \quad D^\xi \left(\frac{K}{a^2}\right)^{1-\xi} \quad , \tag{15.46}$$

qui est bien plus générale que l'expression (15.39) mais l'englobe cependant dans le cas particulier $\xi = 1/2$.

15.3.2 Le problème associé de l'oscillateur de Morse

Revenons désormais au problème original avec le potentiel de Morse. Il s'agit donc de résoudre l'équation (15.29). Pour cela, on peut s'appuyer sur les travaux de Morse lui-même et introduire le changement de variable

$$z = 2\delta \exp(-ay) \quad \text{avec} \quad \delta = \frac{\beta}{a}\sqrt{2DK} \quad , \tag{15.47}$$

ainsi que la transformation $\phi_n(y) = e^{-z/2}\, z^s\, w_n(z)$ où $s = \delta\sqrt{1 - e_n/D}$. Cela permet de mettre l'équation à résoudre sous la forme

$$z\frac{\mathrm{d}^2 w_n}{\mathrm{d}z^2} + (2s + 1 - z)\frac{\mathrm{d}w_n}{\mathrm{d}z} + n w_n = 0 \quad , \tag{15.48}$$

en posant $n = \delta - s - 1/2$. Si n est un entier positif, la solution de (15.48) est un polynôme de Laguerre [112].

En remarquant que les fonctions propres $\phi_n(y)$ ne restent finies sur tout l'intervalle $[0, +\infty[$ que dans le cas des valeurs positives de s, on obtient le spectre suivant pour les états liés :

$$\frac{e_n}{D} = 1 - \left(1 - \frac{n + 1/2}{\delta}\right)^2 \quad \text{avec} \quad n = 0, 1, \ldots, E(\delta - 1/2) \quad , \tag{15.49}$$

où l'on note $E(.)$ la fonction partie entière. On en conclut directement que tant que le paramètre δ est supérieur à la valeur critique $\delta_c = 1/2$, l'état fondamental est un état lié. Dans le problème de mécanique quantique, ce critère correspond au seuil de masse au-dessous duquel la particule sera expulsée

du creux de potentiel par les fluctuations quantiques. Notons que c'est une propriété spécifique aux potentiels asymétriques puisque les puits symétriques possèdent toujours un état fondamental localisé [32, 111].

En utilisant l'équation (15.47), ce seuil δ_c définit une température critique :

$$T_c = \frac{2\sqrt{2KD}}{ak_B} \quad . \tag{15.50}$$

Lorsque la température augmente en se rapprochant de T_c, le dernier état lié devient de moins en moins localisé, et le paramètre d'ordre $\langle y \rangle$ augmente très rapidement, cela correspond précisément à la transition de phase.

Le calcul complet confirme donc le calcul approché précédent et on peut noter qu'au facteur π près, la température critique que nous obtenons est identique à celle que donnait le potentiel simplifié $V'(y)$ avec l'expression (15.39).

En utilisant les équations (15.27) et (15.49), on déduit l'énergie libre par site $f = e_0 + f_0$, avec

$$f_0 = -\frac{1}{2\beta} \ln \left[\left(\frac{2\pi}{\beta} \right)^2 \frac{m}{K} \right] \tag{15.51}$$

et

$$\begin{aligned} e_0 &= D\left[1 - |t|^2\right] \qquad \text{si } T < T_c \\ &= D \qquad\qquad\qquad \text{sinon} \quad , \end{aligned} \tag{15.52}$$

où $t = T/T_c - 1$ est la température réduite. On en déduit que l'entropie par site peut s'écrire sous la forme d'une partie non singulière

$$S_{\text{non-sing}} = S(T_c) + k_B \log \left(\frac{T}{T_c} \right) \tag{15.53}$$

et d'une partie singulière,

$$\begin{aligned} S_{\text{sing}} &= \frac{2D}{T_c}\, t \qquad \text{si} \quad T < T_c \\ &= 0 \qquad\qquad \text{si} \quad T > T_c \quad . \end{aligned} \tag{15.54}$$

Ce résultat (15.54) signifie qu'il y a un saut de la capacité calorifique à la température T_c, tandis que l'exposant critique α, qui donne l'évolution de la capacité calorifique c quand T approche T_c ($T < T_c$) sous la forme $c \propto t^{-\alpha}$, vaut $\alpha = 0$. La transition est donc du second ordre.

15.3.3 Le paramètre d'ordre pour l'ADN

La quantité que l'on observe directement lors des expériences de dénaturation de l'ADN est la fraction de paires de bases liées car elle détermine

l'absorption de la lumière UV par l'échantillon. C'est une quantité que l'on peut obtenir par le calcul en considérant que toutes les paires de bases pour lesquelles la distance y est en-dessous d'un seuil b sont fermées.

La probabilité $P(y < b, T)$ de trouver une paire de base à une distance d'équilibre plus petite que b est donnée par :

$$P(y < b, T) = \int_{-\infty}^{b} \mathrm{d}y \; |\phi_0(y)|^2 \quad . \tag{15.55}$$

En utilisant la solution de l'équation (15.48) on peut en obtenir une expression analytique

$$P(y < b, T) = 1 - \frac{\gamma(2\delta - 1, 2\delta e^{-ab})}{\Gamma(2\delta - 1)} \tag{15.56}$$

$$\approx (2\delta - 1) \; Ei(2\delta e^{-ab}) \tag{15.57}$$

qui fait intervenir la fonction Gamma Γ, la fonction gamma incomplète γ et la fonction exponentielle-intégrale Ei [13] ; la dernière ligne n'est valable qu'au voisinage de T_c. L'expression est complexe, mais le résultat important est que, dans le cadre du modèle d'hamiltonien (15.1), la fraction de paires de bases liées approche zéro de manière linéaire lorsque T tend vers T_c (cf. fig. 15.12). Cette conclusion est valable quel que soit le choix de b qui n'intervient que dans la pente de la courbe.

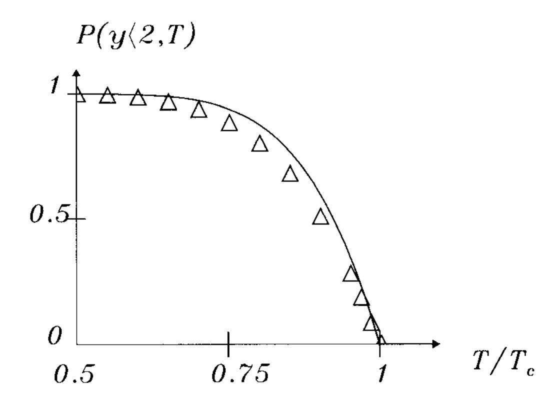


FIG. 15.12 – Fraction de paires de bases liées $P(y < 2\text{Å}, T)$ en fonction de T/T_c dans le modèle d'ADN. Les triangles correspondent aux valeurs déduites d'une recherche numérique des états propres de l'opérateur de transfert, alors que la courbe continue correspond à la prédiction théorique (15.57) qui utilise l'approximation des milieux continus.

Lorsqu'on compare la figure 15.12 avec une courbe de dénaturation expérimentale de l'ADN (cf. fig. 15.5) on constate que la prévision théorique n'est pas en accord quantitatif avec l'expérience car le modèle conduit à une

dénaturation très progressive de la double hélice, déjà nettement perceptible quand $T = 0{,}75\ T_c$, alors que les expériences détectent une dénaturation très brutale, correspondant pratiquement à une transition du premier ordre. Cela provient du fait que nous nous sommes contentés ici d'un modèle très simplifié de la molécule. Sans changer fondamentalement le modèle, on peut obtenir une courbe de dénaturation en bon accord avec l'expérience si l'on tient compte du fait que le potentiel d'interaction d'empilement des bases n'est pas le potentiel harmonique $\frac{1}{2}K(y_n - y_{n-1})^2$ que nous avons introduit dans l'hamiltonien (15.1). Dans la réalité, quand une base commence à sortir de l'hélice, son énergie d'interaction avec les voisines décroît. On peut en rendre compte par un potentiel d'empilement anharmonique. On obtient alors une transition de dénaturation qui se produit dans une étroite gamme de températures [40], mais le traitement de l'opérateur de transfert doit être fait numériquement.

15.4 Stabilité d'une paroi de domaine : une autre approche de la dénaturation

Jusqu'à présent, nous avons traité la thermodynamique du modèle d'ADN par des méthodes standards de physique statistique. Nous allons montrer que le concept de soliton permet de proposer une interprétation élégante de la dénaturation en déterminant par un calcul relativement simple pourquoi et quand la transition se produit. Il existe une solution non-linéaire exacte liant une portion de l'ADN qui est sous forme de double hélice et une portion dénaturée. C'est une paroi de domaine entre les deux phases. À la limite thermodynamique, c'est-à-dire dans un système où le nombre de paires de bases tend vers l'infini, son énergie est infinie car chacun des sites de la phase dénaturée apporte une contribution finie d'énergie. C'est cette particularité qui permet l'existence de la transition de phase dans ce système unidimensionnel. L'étude des propriétés de cette paroi de domaine va nous permettre de déterminer la température de transition.

15.4.1 La paroi de domaine

Pour obtenir une solution analytique, nous allons faire l'approximation des milieux continus, tout en sachant qu'elle n'est pas très bonne dans le cas de l'ADN. Nous verrons ultérieurement comment il est possible d'aller au-delà. Dans cette approximation les équations de mouvement adimensionnées (15.6) donnent

$$\frac{\partial^2 Y}{\partial t^2} - S\,\frac{\partial^2 Y}{\partial x^2} + \frac{\partial V(Y)}{\partial Y} = 0 \quad \text{avec} \quad V(Y) = \left(e^{-Y} - 1\right)^2 \quad , \qquad (15.58)$$

en utilisant le paramètre de maille (c'est-à-dire la distance entre deux paires de bases) comme unité de longueur dans la direction x.

Outre les solutions correspondant aux modes de respiration que nous avons étudiées à la section 15.2, cette équation non-linéaire possède des solutions exactes de type paroi de domaine. En effet, si l'on cherche une solution indépendante du temps, on obtient

$$-S\frac{\mathrm{d}^2Y}{\mathrm{d}x^2} + \frac{\partial V(Y)}{\partial Y} = 0 \quad \text{avec} \quad V(Y) = \left(e^{-Y} - 1\right)^2 \quad , \tag{15.59}$$

et l'on retrouve un problème formellement identique à l'équation du mouvement d'une particule dans le potentiel $V(Y)$ dans lequel la variable x remplace le temps. Il s'intègre par quadrature. On multiplie l'équation par $\mathrm{d}Y/\mathrm{d}x$ et on intègre par rapport à x pour obtenir

$$-\frac{1}{2}S\left(\frac{\mathrm{d}Y}{\mathrm{d}x}\right)^2 + V(Y) = C \quad , \tag{15.60}$$

où C est une constante d'intégration que l'on détermine par les conditions aux limites. En cherchant une solution qui tend vers l'état d'équilibre $Y = 0$ lorsque x tend vers $-\infty$, on obtient $C = 0$. La solution est ensuite calculée par séparation des variables. L'équation (15.60) donne

$$\pm\sqrt{\frac{S}{2}}\frac{\mathrm{d}Y}{\mathrm{d}x} = \left(e^{-Y} - 1\right) \quad \text{ou} \quad \frac{\mathrm{d}Y \;\; e^Y}{e^Y - 1} = \mp\sqrt{\frac{2}{S}}\,\mathrm{d}x \quad , \tag{15.61}$$

qui s'intègre immédiatement en

$$\ln\left(e^Y - 1\right) = \mp\sqrt{\frac{2}{S}}(x - x_0) \quad , \tag{15.62}$$

qui s'écrit encore

$$Y(x) = \ln\left[1 + e^{\mp\sqrt{2/S}\,(x-x_0)}\right] \quad , \tag{15.63}$$

où x_0 est une constante d'intégration qui détermine la position de la paroi de domaine. Cette solution est représentée sur la figure 15.13. Elle correspond à une configuration liant une partie de la chaîne ($x < x_0$) où les paires de bases sont fermées avec une zone (pour les points $x \gg x_0$) où la séparation entre les brins croît linéairement.

Évaluons l'énergie de cette solution dans une chaîne finie de N paires de bases. Les sites d'indice inférieur à x_0 sont tels que $Y \simeq 0$. Le potentiel de Morse et l'énergie de couplage entre deux sites voisins sont nuls dans cette région qui ne contribue donc pas à l'énergie. Pour les sites d'indice supérieur à x_0, $Y \gg 1$ et le potentiel de Morse prend la valeur 1 tandis que $\mathrm{d}Y/\mathrm{d}x \simeq \sqrt{2/S}$ ce qui correspond à une énergie de couplage $\frac{1}{2}S(\sqrt{2/S})^2 = 1$. Ainsi, chaque site d'indice supérieur à x_0 contribue à l'énergie par $e = 2$. L'énergie de la paroi est donc

$$E_P^+ = 2\,(N - x_0) + \mathcal{O}(N^0) \quad . \tag{15.64}$$

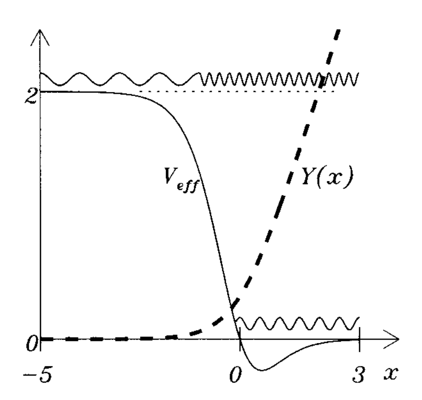


FIG. 15.13 – La ligne en pointillés représente la solution paroi de domaine (15.63) (solution correspondant au signe + dans l'exponentielle). La ligne continue représente le potentiel effectif de l'équation de Schrödinger (15.69) et les ondulations représentent qualitativement les modes de vibration de la paroi de domaine.

Le terme $\mathcal{O}(N^0)$ correspond à la contribution du coeur de la paroi où la solution évolue progressivement du fond de puits vers le plateau du potentiel de Morse et l'exposant $^+$ indique simplement que nous avons calculé l'énergie de la solution comportant le signe + dans l'exponentielle. Comme nous l'avons déjà mentionné, l'énergie de la paroi devient infinie lorsque N tend vers ∞.

À température nulle, la solution (15.63) n'est pas stable, puisque la paroi peut abaisser son énergie en augmentant x_0, ce qui revient à augmenter le domaine dans lequel les paires de bases sont fermées. Ceci correspond simplement au fait qu'à température nulle, l'état stable de l'ADN est l'état en double hélice dans lequel les bases sont appariées. Contrairement aux autres théories des champs de type Klein-Gordon avec une énergie *finie* du kink ou de la paroi de domaine, dans le cas de la paroi de domaine du modèle d'ADN, il n'y a pas de mode de Goldstone de fréquence nulle. Il faut fournir une énergie pour modifier la position de la paroi de manière à inclure davantage de sites avec des paires de bases ouvertes. La différence avec le modèle ϕ^4 étudié au chapitre 10 se situe dans l'écart énergétique entre les deux états liés par la paroi.

En présence des fluctuations thermiques, les effets entropiques s'ajoutent aux effets énergétiques pour déterminer la stabilité de la paroi. Pour les évaluer, il faut étudier les perturbations autour de cette solution paroi de domaine.

15.4.2 Fluctuations autour de la paroi de domaine

Pour cela, on cherche une solution sous la forme

$$Y(x,t) = Y_P(x) + f(x,t) \quad , \tag{15.65}$$

où $Y_p(x)$ désigne la solution (15.63) et $f(x,t)$ est supposé assez petit pour que l'on puisse linéariser l'équation en f. En introduisant cette solution dans l'équation du mouvement (15.58), on obtient :

$$\frac{\partial^2 f}{\partial t^2} - S\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} - S\frac{\partial^2 Y_P}{\partial x^2} + \mathcal{F}(Y_P) + f(x,t)\left(\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial Y}\right)_{Y=Y_P} = 0 \qquad (15.66)$$

$$\text{avec} \quad \mathcal{F}(Y) = \frac{\partial V(Y)}{\partial Y} \quad .$$

Les 3[e] et 4[e] termes de l'équation (15.66) ont une somme nulle puisque Y_P est une solution statique de l'équation du mouvement (15.59). L'équation pour $f(x,t)$ se réduit donc à

$$\frac{\partial^2 f}{\partial t^2} - S\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + V_{\text{eff}}(x)\, f(x,t) = 0 \quad . \qquad (15.67)$$

Le potentiel effectif V_{eff}, représenté sur la figure 15.13, se déduit de l'expression de $\mathcal{F}(Y)$ et de $\exp(Y_p) = 1 + \exp(z)$ avec $z = \sqrt{2/S}\,(x - x_0)$ qui résulte de la solution (15.63) pour Y_P. Il s'exprime par :

$$V_{\text{eff}} = -2\frac{e^z - 1}{\left(1 + e^z\right)^2} \quad . \qquad (15.68)$$

En cherchant une solution de l'équation (15.67) sous la forme $f(x,t) = \exp(-i\omega t)\, g(x)$, on obtient

$$-S\,\frac{\partial^2 g}{\partial x^2} + V_{\text{eff}}(x)\, g(x) = \omega^2\, g(x) \quad , \qquad (15.69)$$

qui est encore une équation formellement identique à une équation de Schrödinger. Le potentiel V_{eff} est tel qu'il ne possède pas d'état lié, mais on peut prévoir l'existence de deux types d'états étendus :

- pour $\omega^2 < 2$, la solution $g(x)$ sera située dans la région $x > x_0$;
- pour $\omega^2 > 2$, la solution s'étend à tout l'espace mais, comme $V_{\text{eff}}(x)$ a des valeurs différentes pour $x < x_0$ et $x > x_0$, les relations de dispersion, des ondes qui sont solutions sont différentes dans les deux régions.

Ces états étendus sont schématisés sur la figure 15.13.

L'expression du potentiel $V_{\text{eff}}(x)$ permet la résolution analytique de l'équation (15.69). On peut cependant obtenir très simplement une solution approchée qui contient toute la physique des phénomènes en considérant que le potentiel change de manière abrupte de la région $x < x_0$ vers la région $x > x_0$ comme représenté sur le figure 15.14. Avec cette simplification les bases d'indice $n \leq x_0$ sont supposées fermées et le potentiel dans ce domaine vaut $V_{\text{eff}}(x) = 2$. Les solutions de l'équation (15.69) sont de la forme $g(x) = \exp(iqx)$ où q et ω sont liés par la relation de dispersion $\omega^2 = 2 + Sq^2$ qui est la limite pour q faible (correspondant à l'approximation des milieux

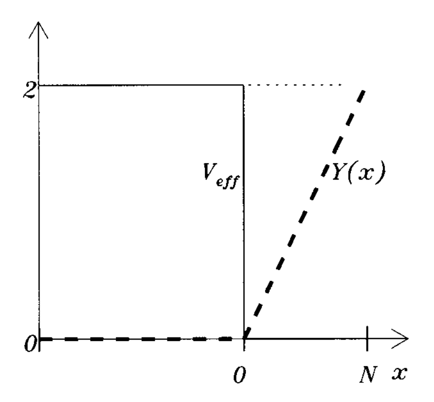


FIG. 15.14 – Représentation simplifiée de la paroi de domaine (trait pointillé) et du potentiel effectif $V_{\text{eff}}(x)$ qu'elle crée pour les fluctuations (trait continu) dans une chaîne de N paires de bases. Cette figure est l'analogue de la figure 15.13.

continus) de la relation (15.12) que nous avions obtenue en cherchant les solutions non-linéaires pour la dynamique du modèle.

Les paires de bases d'indice $n > x_0$ sont supposées totalement ouvertes, c'est-à-dire que la variable Y a une valeur correspondant au plateau du potentiel de Morse. Dans cette région, on fait l'approximation $V_{\text{eff}}(x) = 0$ et la solution pour $g(x)$, toujours sous la forme $g(x) = \exp(iqx)$, est telle que $\omega^2 = Sq^2$.

15.4.3 Énergie libre de la paroi de domaine

Nous avons maintenant les éléments pour calculer l'énergie libre F de la paroi de domaine à la position x_0 que nous considérons sous la forme simplifiée de la figure 15.14. Elle est constituée de deux contributions :

$$F = F_P + F_{\text{fluctuations}} \quad . \tag{15.70}$$

– Le terme F_P est l'énergie libre de la solution Y_P *pour* x_0 *donné.* Elle se réduit à l'énergie de la paroi puisqu'il n'y a aucun terme entropique, x_0 étant choisi et la solution Y_P étant imposée. Le terme F_P est donc donné par l'expression (15.64)

$$F_P = 2(N - x_0) \quad , \tag{15.71}$$

dans laquelle nous n'incluons pas la petite correction due à la forme exacte de la paroi puisque nous considérons la solution approchée de la figure 15.14.

– Le terme $F_{\text{fluctuations}}$ représente l'énergie libre des modes de fluctuations autour de la paroi de domaine que nous avons calculés dans la section précédente.

Ces modes ont été calculés dans l'approximation harmonique : leurs énergies correspondent donc à celles d'oscillateurs harmoniques de fréquence $\omega(q)$.

Pour obtenir l'énergie libre associée il est commode d'utiliser les propriétés des oscillateurs quantiques et de prendre ensuite la limite classique. L'énergie d'un mode d'oscillation de la paroi est donc

$$E(q) = n_q \, \hbar\omega(q) \quad , \tag{15.72}$$

où n_q est le nombre de quanta d'excitation d'un oscillateur (nous n'introduisons pas l'énergie de point 0, $\hbar\omega(q)/2$, car nous sommes intéressés par la limite classique du résultat).

Pour un oscillateur (c'est-à-dire une des fréquences $\omega(q)$), la fonction de partition est obtenue par sommation sur tous les états d'excitation. Elle est facile à calculer puisqu'il s'agit de sommer une série géométrique, ce qui donne :

$$Z_q = \sum_{n_q=0}^{\infty} \exp\Big(-\beta\hbar\omega(q) n_q \Big) = \frac{1}{1 - \exp\big(-\beta\hbar\omega(q)\big)} \quad . \tag{15.73}$$

On retrouve la formule de Bose-Einstein usuelle.

À la limite classique où $\hbar\omega(q) \ll k_B T$, on peut remplacer l'exponentielle par son développement au premier ordre $\exp(-\beta\hbar\omega(q)) \simeq 1 - \beta\hbar\omega(q)$, de sorte que l'on obtient simplement :

$$Z_q = \frac{1}{\beta\hbar\omega(q)} \quad . \tag{15.74}$$

On peut noter que la limite classique est parfaitement justifiée pour la dynamique des bases de l'ADN, qui sont des groupements de grande taille, dont les mouvements d'ensemble ont des fréquences de l'ordre de $5 \cdot 10^{11}$ Hz, qui correspondent à $\hbar\omega \approx 2 \cdot 10^{-3}$ eV alors que $k_B T$ est de l'ordre de $25 \cdot 10^{-3}$ eV à la température ambiante.

La fonction de partition d'un ensemble d'oscillateurs indépendants est le *produit* des fonctions de partition de chaque oscillateur. En effet, la fonction de partition Z mesure le nombre d'états accessibles au système. Si l'on considère un système S_1 ayant n_1 états et un système S_2 ayant n_2 états indépendamment de S_1, pour le système formé de S_1 et S_2, à chaque état de S_1 correspondent n_2 états de S_2, ce qui donne un nombre total d'états $n_1 \times n_2$. La fonction de partition pour l'ensemble des oscillateurs harmoniques correspondant aux fluctuations autour de la paroi de domaine est

$$Z = \prod_q \frac{1}{\beta\hbar\omega(q)} \quad , \tag{15.75}$$

correspondant à l'énergie libre

$$F_{\text{fluctuations}} = -k_B T \ln Z = k_B T \sum_q \ln\Big(\beta\hbar\omega(q)\Big) \quad . \tag{15.76}$$

Cette somme discrète n'est pas facile à calculer mais on peut la remplacer par une intégrale en tenant compte du grand nombre de modes $\omega(q)$.

Pour un réseau de p particules, les vecteurs d'ondes possibles sont $q_\ell = \ell\pi/p$ ($\ell = 0, \ldots, p-1$), c'est-à-dire que la variation de q d'un mode au suivant est $\Delta q = \pi/p$, ce qui donne une densité d'états $1/\Delta q = p/\pi$. À partir de cette densité d'états, on obtient

$$\sum_q f[\omega(q)] \simeq \frac{1}{\Delta q} \int \mathrm{d}q f[\omega(q)] \quad , \tag{15.77}$$

où $f[\omega(q)]$ désigne une fonction quelconque de $\omega(q)$.

Pour une molécule d'ADN comportant N paires de bases, possédant une paroi de domaine à la position x_0, nous avons x_0 particules ayant la relation de dispersion $\omega(q) = \sqrt{2+Sq^2}$ et $N - x_0$ particules ayant la relation de dispersion $\omega(q) = \sqrt{S}\, q$. On obtient donc :

$$F_{\text{fluctuations}} = k_B T \, \frac{x_0}{\pi} \int_0^\infty \mathrm{d}q \, \ln\left(\beta\hbar\sqrt{2+Sq^2}\right) + k_B T \, \frac{N - x_0}{\pi} \int_0^\infty \mathrm{d}q \ln\left(\beta\hbar\sqrt{S}\, q\right) \quad , \tag{15.78}$$

où les intégrales sur q ont été étendues jusqu'à l'infini, ce qui est cohérent avec l'approximation des milieux continus que nous utilisons pour ce calcul. En séparant les termes qui dépendent de la position x_0 de la paroi on obtient :

$$F_{\text{fluctuations}} = \frac{k_B T}{\pi} \, x_0 \int_0^\infty \mathrm{d}q \ln\left(\frac{\sqrt{2+Sq^2}}{\sqrt{S}\, q}\right) + F_1 \quad , \tag{15.79}$$

où F_1 est une quantité qui ne dépend pas de x_0. L'intégrale de l'équation (15.79), que nous noterons I, peut être calculée par

$$I = \int_0^\infty \mathrm{d}q \ln\sqrt{\frac{2}{Sq^2}+1} = \frac{1}{2}\int_0^\infty \mathrm{d}q \ln\left(1+\frac{2}{Sq^2}\right) \quad , \tag{15.80}$$

en posant $u = q\sqrt{2/S}$ et en notant que :

$$\int_0^\infty \mathrm{d}u \frac{\ln(1+u^2)}{u^2} = \pi \quad . \tag{15.81}$$

On obtient :

$$F_{\text{fluctuations}} = k_B T \frac{x_0}{2}\sqrt{\frac{2}{S}} + F_1 \quad . \tag{15.82}$$

En rassemblant les résultats (15.71) et (15.82), on arrive à la forme suivante pour l'énergie libre de la paroi de domaine :

$$F = x_0 \left[\frac{k_B T}{2}\sqrt{\frac{2}{S}} - 2\right] + F_1' \quad , \tag{15.83}$$

où F_1' est une contribution *qui ne dépend pas de* x_0.

- Pour T faible (ou $T = 0$), l'expression entre crochets est négative. La molécule peut abaisser son énergie libre en augmentant x_0. Compte tenu de la forme de la paroi de domaine, cela augmente la taille du domaine où les paires de bases sont fermées. Ce phénomène traduit le fait que c'est l'état en double hélice qui est l'état stable de l'ADN à basse température.
- Pour T grand, l'expression entre crochets est positive. La molécule peut abaisser son énergie libre en diminuant x_0, donc en ouvrant les paires de bases qui étaient fermées.
- Pour $(k_B T/2)\sqrt{2/S} = 2$, soit

$$T = T_c = \frac{2}{k_B}\sqrt{2S} \quad , \tag{15.84}$$

l'énergie de la molécule est *indépendante de la position* x_0 de la paroi séparant la zone ouverte de la zone fermée. Cette valeur de température apparaît donc comme la *température de transition* à laquelle la molécule passe de l'état en double hélice à l'état dénaturé.

Il est important de noter que si l'on repasse à des variables dimensionnées en remplaçant S par sa valeur $S = K/(Da^2)$ et en tenant compte du fait que les énergies $k_B T$ sous forme dimensionnées s'obtiennent en multipliant par D l'énergie adimensionnée (cf. section 15.2.1), on obtient $T_c = 2\sqrt{2KD}/(ak_B)$ qui est *exactement la température de transition de phases donnée par l'intégrale de transfert* (cf. (15.50)).

15.4.4 Discussion

On constate donc qu'en étudiant l'énergie libre d'une excitation non-linéaire localisée, la paroi de domaine, on peut retrouver exactement les propriétés thermodynamiques du modèle d'ADN. Ce résultat montre que l'approche fondée sur les solitons (ou les excitations non-linéaires localisées, car la paroi de domaine de l'ADN n'est pas un soliton) fournit une méthode alternative qui peut être intéressante pour étudier les propriétés d'un système physique.

En fait, elle est même *plus performante* que la méthode habituelle de l'intégrale de transfert car elle permet aisément de tenir compte des effets de discrétisation, ce que l'on ne peut faire que perturbativement, et assez difficilement, pour l'intégrale de transfert.

Nous avons déjà signalé que l'ADN constitue un système dans lequel le couplage est assez faible puisque nous avons trouvé $S = 0{,}099$ avec nos paramètres. On doit tenir compte des effets de discrétisation qui interviennent en particulier dans les relations de dispersion des petits mouvements autour de la paroi qui deviennent

$$\omega_q^2 = \begin{cases} 2 + 4S\sin^2(q/2) = 2 + 2S(1 - \cos q) & \text{pour } x > x_0 \\ 4S\sin^2(q/2) = 2S(1 - \cos q) & \text{pour } x < x_0 \end{cases} ,$$

comme le montre par exemple l'équation (15.12).

Si l'on admet que la forme de la paroi de domaine elle-même n'est pas modifiée par les effets de discrétisation (ce que confirme la recherche numérique de la solution exacte pour la paroi de domaine dans le réseau discret) et que les effets de réseau n'affectent que les fluctuations, on peut reprendre le calcul de la section précédente avec les nouvelles relations de dispersion. On doit limiter l'intégrale en q à $q = \pi$ au lieu de l'étendre jusqu'à l'infini. Le seul changement intervient au niveau de l'intégrale (15.79) qui devient

$$F_{\text{fluctuations}} = \frac{k_B T}{\pi} \, x_0 \int_0^{\pi} \mathrm{d}q \quad \ln\left(\frac{\sqrt{2 + 2S(1-\cos q)}}{\sqrt{2S(1-\cos q)}}\right) + F_1 \quad , \quad (15.85)$$

que l'on peut calculer en utilisant

$$\int_0^{\pi} \mathrm{d}u \ln\left[1 - \cos u + \frac{1}{S}\right] = 2\pi \ \ln\left[\sqrt{1/(2S)} + \sqrt{1 + 1/(2S)}\right] \quad . \quad (15.86)$$

On obtient finalement la nouvelle valeur de la température critique en variables dimensionnées,

$$T_c = \frac{2D}{k_B \ \ln\left[\sqrt{1/(2S)} + \sqrt{1 + 1/(2S)}\right]} \quad , \quad (15.87)$$

qui tend vers la valeur trouvée précédemment (cf. (15.50)), dans la limite S grand, correspondant au couplage fort pour lequel l'approximation des milieux continus est valable.

La figure 15.15 compare les résultats exacts pour la température de dénaturation du modèle d'ADN obtenus par un traitement numérique de l'intégrale de transfert avec les expressions analytiques obtenues, d'une part, dans la limite des milieux continus (soit par traitement analytique de l'intégrale de transfert soit en raisonnant avec la paroi de domaine) et, d'autre part, en tenant compte des effets de discrétisation dans les fluctuations de la paroi. On constate que, bien qu'elle ne soit pas encore tout à fait exacte pour les grandes valeurs de $1/S$, l'expression (15.87) donne néanmoins une très bonne approximation du résultat exact.

Cet exemple montre l'intérêt de l'étude des excitations non-linéaires localisées dans un système physique, non seulement pour étudier la dynamique du système, mais aussi pour permettre une nouvelle approche de la physique statistique du système, qui se révèle très fructueuse puisqu'elle peut fournir un résultat qui serait difficile à obtenir par une méthode traditionnelle.

Le modèle non-linéaire d'ADN que nous avons introduit dans ce paragraphe se révèle donc intéressant à plusieurs titres. Les solutions quasi-soliton que l'on peut obtenir par une réduction à une équation de NLS correspondent bien aux « modes de respiration de l'ADN » observés par les biologistes. De plus elles mettent en évidence des phénomènes de localisation temporaire de

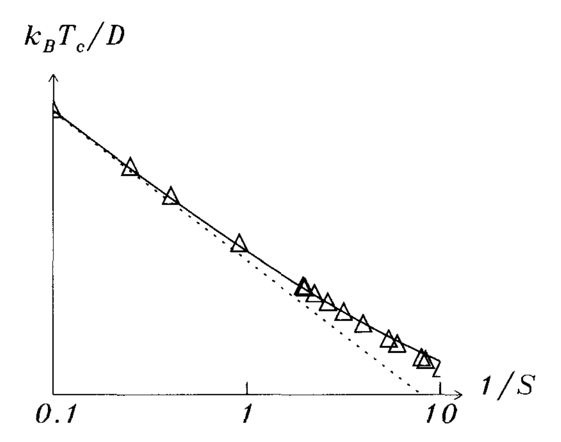


FIG. 15.15 – Évolution de la température critique en fonction du paramètre de discrétisation $1/S$. La courbe en pointillés montre l'estimation (15.50) dans la limite des milieux continus, alors que la courbe continue montre la solution discrète (15.87) ; les triangles correspondent aux résultats exacts obtenus par un traitement numérique de l'intégrale de transfert.

l'énergie thermique par un effet purement non-linéaire, qui ont peut-être des conséquences biologiques, mais jouent aussi le rôle d'états précurseurs de la dénaturation. Le modèle est aussi intéressant du point de vue de la physique statistique car c'est probablement le plus simple qui possède une transition de phase et qui puisse être traité exactement analytiquement (dans la limite du couplage fort) [41].

Nous avons présenté dans ce chapitre quelques-unes des propriétés les plus simples de ce modèle. D'autres aspects peuvent être étudiés, comme le facteur de structure statique qui présente, au voisinage de T_c une composante intense à très faible vecteur d'onde vraisemblablement liée aux excitations non-linéaires du système, comme le pic central des ferroélectriques étudié au chapitre 10 à partir du modèle ϕ^4. L'étude est cependant plus complexe ici car, contrairement aux kinks du modèle ϕ^4 qui ont un seul degré de liberté, le mode de translation, les fluctuations d'ouverture de l'ADN ont aussi un degré de liberté interne d'oscillation et on observe, de plus, qu'au voisinage immédiat de T_c, elles servent de noyau de nucléation à des zones ouvertes que l'on peut décrire approximativement comme formées de deux parois de domaines proches, correspondant aux deux interfaces entre zones ouvertes et fermées qui limitent la « bulle de dénaturation ». Du point de vue de la physique non-linéaire et de la physique statistique, il y a donc encore de nombreuses questions ouvertes à propos de ce modèle, pourtant extrêmement simplifié de l'ADN.

Conclusion
Les solitons existent-ils ?

CET OUVRAGE NOUS a fait parcourir la physique du macroscopique au microscopique et nous avons rencontré les solitons à ces différentes échelles. La raison en est que leurs conditions d'existence reposent sur des propriétés très générales, la coexistence de la dispersion et de la non-linéarité dans un système étendu. Le concept de soliton n'est donc pas confiné à un domaine particulier de la physique, et c'est ce qui fait tout son intérêt.

La non-linéarité est omniprésente en physique et c'est la linéarité qui est l'exception à tel point que l'on peut regretter qu'il faille avoir recours à la négation, « non »-linéarité, pour nommer cette propriété si générale. De même, la dispersion est extrêmement répandue car il est très rare que les composantes à différentes longueurs d'ondes qui constituent un signal complexe aient exactement la même vitesse de propagation.

Il n'est donc pas étonnant que ces deux propriétés si courantes, et qui agissent en général en sens inverse, car la non-linéarité tend à localiser les signaux alors que la dispersion les étale, puissent, dans certains régimes, compenser leurs effets et conduire à des solitons dans des systèmes très variés.

Plus que les résultats que nous avons présentés, ce qu'il faut retenir c'est la méthode de travail pour aborder les systèmes non-linéaires et dispersifs que l'on rencontre si souvent en physique.

La première démarche est de chercher quels sont les phénomènes et les degrés de liberté pertinents. C'est, bien entendu, ce que l'on fait de manière très générale en physique, que l'on étudie les solitons ou non, mais c'est un point qui prend encore plus d'importance lorsque l'on sait que l'on s'intéresse aux propriétés non-linéaires du système car on peut *a priori* s'attendre à obtenir des équations qui seront difficiles à résoudre. Il faut penser à toutes les simplifications possibles dès le début de la modélisation.

Le second point important est de veiller à conserver la notion d'espace dans l'analyse. Cela signifie que, contrairement à ce que l'on a tendance à faire lorsqu'on se limite à des approximations linéarisées, il faut éviter de passer dans l'espace réciproque par une transformée de Fourier spatiale. Nous avons vu que le raisonnement issu des développements perturbatifs en modes

normaux à probablement contribué à bloquer pendant dix ans la solution du problème de Fermi-Pasta-Ulam.

Pour la majorité des systèmes, après l'analyse physique préliminaire, on arrive à des équations non-linéaires et dispersives que l'on ne sait pas traiter. C'est à ce niveau qu'il est utile d'avoir à l'esprit les grandes classes d'équations non-linéaires à solitons, qui constituent des modèles limites vers lesquels de nombreux systèmes peuvent tendre lorsqu'on en fait une description approximative par les méthodes que nous avons vues (approximation des milieux continus, développement en échelles multiples, par exemple).

Comme ces équations à solitons ne sont obtenues pour les systèmes physiques que de manière approximative, on peut dire qu'*en physique, les solitons n'existent pas.*

Et pourtant nous avons vu qu'*ils permettent de comprendre de nombreuses observations expérimentales*, qui vont de la stabilité remarquable de certaines vagues dans l'océan, au facteur de structure de diffusion des neutrons par les matériaux ferroélectriques ou magnétiques.

La solution de ce paradoxe apparent provient des propriétés exceptionnelles des solitons. Lorsque l'on passe de l'équation à solitons, en tant que description idéalisée d'un système, à la modélisation des phénomènes réels qui ajoute de nombreux termes perturbatifs à l'équation initiale, l'essentiel des propriétés des solitons est préservé. Cela a des conséquences sur les méthodes d'analyse théorique des problèmes. On peut envisager d'abord des approximations qui semblent parfois sévères pour réduire les équations initiales à l'une des grandes classes d'équations à solitons. Ce que l'on déduira de cette équation sera encore utile pour le système réel. Ensuite, on peut travailler sur les équations perturbées en traitant les solitons comme des entités auxquelles on peut, par exemple, attribuer des paramètres propres (tels qu'une position, une largeur) ; c'est le sens des méthodes de coordonnées collectives qui sont très utiles... pourvu que l'on ait fait une bonne étude préalable pour définir les coordonnées appropriées.

Bien entendu, s'il est incorrect de dire que *les solitons n'existent pas*, bien qu'aucun système physique ne soit décrit exactement par une équation ayant des solutions solitons exacts, il est tout aussi incorrect de dire que *les solitons sont partout.* Il ne faut pas négliger les limitations des modèles, et c'est particulièrement vrai à l'échelle microscopique. Nous avons vu l'exemple des dislocations pour lesquelles les effets de discrétisation sont si importants que la libre propagation devient impossible. Un autre domaine qui a donné lieu à beaucoup de controverses est le rôle des solitons dans les molécules biologiques. La section « News and Views » du journal *Nature* atteste de ces débats avec des articles qui vont de l'approbation enthousiaste [98, 99] à des critiques très sévères [58], justifiées par des affirmations excessives de la part des théoriciens. De nos jours, les opinions passionnées sur le sujet se sont tempérées et, comme les expériences ont progressé, des phénomènes de localisation

non-linéaire ont pu être mis en évidence dans des systèmes modèles proches des systèmes biologiques [47]. Dans les molécules biologiques elles-mêmes, la question reste ouverte. Plutôt que des solitons transportant l'énergie, il est probable que c'est la localisation d'énergie par effet non-linéaire qui sera l'effet le plus important.

Cet ouvrage a bien entendu laissé de nombreuses questions de côté. L'une d'elles est le rôle de la dissipation souvent invoqué comme une cause possible de destruction des solitons. À l'échelle macroscopique, la dissipation peut bien entendu conduire à la disparition des solitons non topologiques ou stopper la propagation des solitons topologiques, mais, par exemple, dans le cas de l'hydrodynamique, ses effets sont souvent assez faibles pour que les principales propriétés des solitons subsistent. Les solitons qui parcourent des centaines de kilomètres dans la mer d'Andaman en sont une illustration. Au niveau microscopique la situation est plus complexe car les équations ne sont pas dissipatives mais un couplage avec d'autres degrés de libertés, ou avec le bain thermique que constituent les molécules de solvant par exemple, peut conduire à une perte d'énergie par les solitons. Mais, en contrepartie, les fluctuations thermiques peuvent aussi fournir l'énergie nécessaire à la création de modes fortement non-linéaires, comme nous l'avons vu dans le cas de l'ADN.

Un autre point que nous n'avons pas abordé est celui des excitations non-linéaires dans les systèmes dont la dimension spatiale est supérieure à 1. C'est un vaste domaine qui est moins avancé que celui des solitons bien que de très nombreuses recherches y aient été consacrées. Cependant, certaines des méthodes que nous avons introduites s'appliquent aussi à ces situations, par exemple la méthode des échelles multiples correspond à la méthode des équations d'amplitudes très utilisée en dimension 2 ou 3. Les approches de coordonnées collectives des solitons ont aussi été employées pour les vortex dans les films magnétiques.

À défaut d'être exhaustif, nous espérons que ce livre aura donné au lecteur envie de poursuivre l'exploration du monde des structures non-linéaires cohérentes où les taches blanches sur la carte sont encore nombreuses.



Appendices

Appendice A

Obtention de l'équation de KdV pour les ondes hydrodynamiques de surface

Les ondes à la surface de l'eau sont très intéressantes pour le physicien car elles correspondent à de nombreux phénomènes directement accessibles à l'observation (depuis les vagues en mer, les ondes de sillage des bateaux jusqu'aux raz-de-marées !) et comportent des classes d'ondes très variées selon les conditions aux limites, allant des ondes linéaires non dispersives aux ondes non-linéaires dispersives.

Cet appendice décrit l'obtention de l'équation de Korteweg-de Vries (KdV) pour les ondes en eau peu profonde à partir des équations de base de l'hydrodynamique. Le calcul est présenté ici en détail car il permet de comprendre la première observation historique du soliton et il mérite qu'on s'y attarde car la justification des approximations et ordres de grandeurs n'est pas immédiate.

A.1 Équations de base et conditions aux limites

Nous considérons un fluide parfait (incompressible et non visqueux). Il est décrit par l'équation d'Euler

$$\rho \frac{\mathrm{d}\overrightarrow{v}}{\mathrm{d}t} = \rho \overrightarrow{g} - \overrightarrow{\nabla} P \quad , \tag{A.1}$$

où ρ est la masse volumique du fluide, $\overrightarrow{v}$ le champ de vitesse, $\overrightarrow{g}$ l'accélération de la pesanteur, et P la pression dans le fluide. Dans cette expression, la dérivée temporelle est une dérivée totale. En développant son expression on obtient

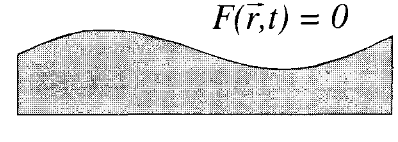
$$\rho \frac{\partial \overrightarrow{v}}{\partial t} + \rho \left(\overrightarrow{v} \cdot \overrightarrow{\nabla} \right) \overrightarrow{v} = \rho \overrightarrow{g} - \overrightarrow{\nabla} P \tag{A.2}$$

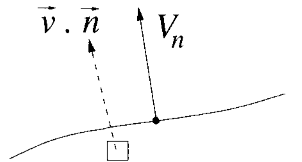
à laquelle il faut ajouter l'équation de conservation de la masse qui, pour le fluide incompressible, se réduit à :

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{v} = 0 \quad . \tag{A.3}$$

Pour obtenir l'équation de propagation des ondes de surface il faut ajouter à ces équations les relations imposées par les conditions aux limites.

A.1.1 Condition à la limite cinématique





On considère la surface séparant un liquide d'un gaz qui exerce une pression uniforme sur la surface d'équation

$$F(\vec{r}, t) = 0 \quad .$$

La surface du fluide est définie par le fait que les molécules ne la traversent pas. La composante orthogonale à la surface $V_n(\vec{r_0}, t)$ de la vitesse d'un point de la surface géométrique du fluide est égale à la composante orthogonale à la surface de la vitesse d'un petit élément de fluide situé infiniment près de cette surface, ce qui s'exprime par

$$\lim_{\vec{r} \to \vec{r_0}} \vec{v}(\vec{r}, t) \cdot \vec{n} = V_n(\vec{r_0}, t) \quad . \tag{A.4}$$

Le vecteur unitaire normal à la surface est donné à partir de l'équation de la surface par $\vec{n} = \vec{\nabla} F(\vec{r_0}, t)/|\vec{\nabla} F(\vec{r_0}, t)|$, et par ailleurs la vitesse $\mathrm{d}\vec{r_0}/\mathrm{d}t$ d'un point de la surface peut être déduite de la formule :

$$\frac{\mathrm{d}F}{\mathrm{d}t} = 0 = \frac{\partial F}{\partial t} + \frac{\mathrm{d}\vec{r_0}}{\mathrm{d}t} \cdot \vec{\nabla} F(\vec{r_0}, t) \quad . \tag{A.5}$$

On obtient donc :

$$V_n(\vec{r_0}, t) = \vec{n} \cdot \frac{\mathrm{d}\vec{r_0}}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{|\vec{\nabla} F(\vec{r_0}, t)|} \vec{\nabla} F(\vec{r_0}, t) \cdot \frac{\mathrm{d}\vec{r_0}}{\mathrm{d}t} \tag{A.6}$$

$$= -\frac{1}{|\vec{\nabla} F(\vec{r_0}, t)|} \frac{\partial F}{\partial t} \quad . \tag{A.7}$$

La condition cinématique (A.4) en un point $\vec{r_0}$ de la surface s'écrit par conséquent :

$$\frac{\partial F(\vec{r_0}, t)}{\partial t} + \vec{v}(\vec{r_0}, t) \cdot \vec{\nabla} F(\vec{r_0}, t) = 0 \quad . \tag{A.8}$$

Il est possible de mettre cette condition sous une forme différente qui sera utile pour la suite. Nous noterons dorénavant u, v, w les composantes de $\vec{v}$

en un point quelconque du fluide. Si l'on connaît l'équation de la surface sous la forme $z = \eta(x, y, t)$, correspondant à $F = \eta(x, y, t) - z$, en calculant $\vec{\nabla} F$ on obtient pour un point de la surface :

$$w = \frac{\partial \eta}{\partial t} + u \frac{\partial \eta}{\partial x} + v \frac{\partial \eta}{\partial y} \quad . \tag{A.9}$$

A.1.2 Condition à la limite physique

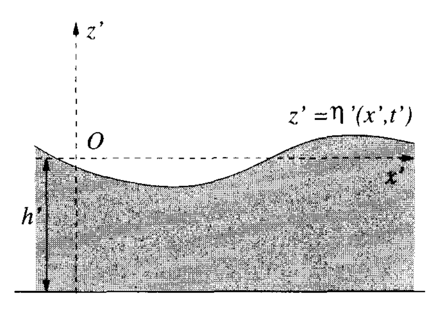
La condition (A.9) est purement géométrique mais ne traduit pas les propriétés physiques particulières de la surface d'un fluide qui sont liées à l'existence d'une *tension superficielle.* La surface d'un fluide se comporte comme une membrane élastique à laquelle est associée une énergie de surface. En présence de tension superficielle, la courbure de la surface du fluide se traduit par une différence de pression entre les deux côtés de la surface. C'est ce phénomène qui explique la montée d'un liquide dans un tube par capillarité. Dans le cas des solitons hydrodynamiques on peut, dans la plupart des cas, négliger l'effet de la tension superficielle car le rayon de courbure de la surface est très grand. Nous nous placerons dans ce cas. La pression dans le fluide en un point très proche de la surface est alors égale à la pression P_A du gaz qui surmonte le fluide.

A.2 Formulation mathématique du problème

L'étude générale des ondes de surface est très difficile. Nous allons définir un problème particulier, bien posé mathématiquement et correspondant à une situation physique représentative des cas réels, sans être trop complexe.

Pour traiter le problème, nous serons amenés à passer à des variables sans dimension. Les variables dimensionnées sont repérées par un $'$.

On considère une couche de fluide incompressible non visqueux *d'épaisseur moyenne* h' située au dessus d'un plan horizontal situé à la position $z' = 0$. On se place dans le cas d'un *mouvement bidimensionnel*, c'est-à-dire que toutes les variables du système sont indépendantes de la coordonnée y' et que la vitesse n'a pas de composante selon y'.



On note $u'(x', z', t')$, 0, $w'(x', z', t')$, les composantes du vecteur vitesse en un point du fluide et $z' = h' + \eta'(x', t')$ l'équation de la surface, où h' est la hauteur de fluide quand il est au repos.

Le fluide est surmonté par un gaz dont la pression P'_A est constante et uniforme dans l'espace. Il est soumis à la densité volumique de force $\overrightarrow{f} = \rho \overrightarrow{g}$ due à la pesanteur.

A.2.1 Les équations de définition du problème

Elles comprennent :

1. L'équation d'Euler dans le volume du fluide. En la divisant par ρ et en explicitant les deux composantes, on obtient :

$$\frac{\partial u'}{\partial t'} + u'\frac{\partial u'}{\partial x'} + w'\frac{\partial u'}{\partial z'} = -\frac{1}{\rho}\frac{\partial P'}{\partial x'} \tag{A.10}$$

$$\frac{\partial w'}{\partial t'} + u'\frac{\partial w'}{\partial x'} + w'\frac{\partial w'}{\partial z'} = -\frac{1}{\rho}\frac{\partial P'}{\partial z'} - g \quad , \tag{A.11}$$

auxquelles on doit ajouter l'équation de conservation de la matière

$$\frac{\partial u'}{\partial x'} + \frac{\partial w'}{\partial z'} = 0 \quad . \tag{A.12}$$

2. La condition à la limite au fond, qui exprime qu'il n'y a pas de composante verticale de la vitesse du fluide en $z' = 0'$

$$w'(z' = 0) = 0 \quad . \tag{A.13}$$

3. La condition à la limite cinématique à la surface,

$$w' = \frac{\partial \eta'}{\partial t'} + u'\frac{\partial \eta'}{\partial x'} \quad \text{en} \quad z' = h' + \eta'(x', t') \quad . \tag{A.14}$$

4. La condition à la limite physique à la surface

$$P_A - P' = 0 \quad \text{en} \quad z' = h' + \eta'(x', t') \quad . \tag{A.15}$$

5. La condition qui précise que la couche liquide a une hauteur moyenne h', c'est-à-dire que la surface est en moyenne à l'altitude $z' = h'$, correspondant à $\eta' = 0$

$$\lim_{K\to\infty} \frac{1}{2K} \int_{-K}^{+K} \eta'(x', t')\mathrm{d}x' = 0 \quad , \tag{A.16}$$

et la condition que la solution ne diverge pas pour $|x'| \to \infty$.

6. Les conditions initiales données à $t' = 0$.

Il n'y a pas de conditions aux limites latérales car on suppose le problème bidimensionnel, indépendant de y', et l'on choisit une condition initiale qui correspond effectivement à un problème bidimensionnel.

A.2.2 Pression statique et pression dynamique

Il est commode d'éliminer des équations la pression du gaz qui surmonte le fluide par comparaison entre la solution statique et la solution dynamique.

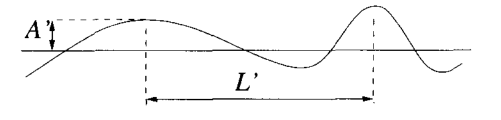
La solution statique ($\overrightarrow{v} = 0$) donne $-g - (1/\rho)\partial P'/\partial z' = 0$ par l'équation (A.11). On en déduit la *pression statique* $P'_0 = -g\rho(z' - h') + P_A$ par intégration et application de la condition à la limite (A.15) en $z' = h'$, qui correspond à la surface au repos. On retrouve bien entendu la relation fondamentale de l'hydrostatique.

On définit la *pression dynamique* $p'(x', z', t') = P'(x', z', t') - P'_0(z')$. En reportant cette expression dans l'équation d'Euler, l'équation (A.10) est inchangée tandis que le terme $-g$ s'élimine de l'équation (A.11). En revanche, l'équation (A.15) exprimant que la pression au niveau de la surface du fluide est égale à la pression extérieure devient :

$$p' = \rho g \eta'(x', t') \quad \text{en} \quad z' = h' + \eta'(x', t') \quad . \tag{A.17}$$

A.2.3 Équations sans dimension

Le passage à des équations sans dimension est important pour réduire le nombre de paramètres du problème car il conduit à des paramètres indépendants les uns des autres, mais il est surtout indispensable pour permettre des approximations correctement contrôlées en donnant une signification réelle à la notion de terme « petit ». Pour cela, il faut définir une longueur caractéristique et un temps caractéristique qui seront les quantités de référence. Pour les quantités ayant la dimension d'une longueur, il est utile de considérer des échelles de longueurs différentes pour décrire la position dans le fluide (coordonnées x' et z') ou les déplacements du fluide car ces variables jouent des rôles très différents dans le problème.



On choisit une amplitude caractéristique A' pour les déformations de la surface, qui sera utilisée pour mesurer les déplacements du fluide selon z' et pour définir les composantes de la vitesse du fluide. On devra avoir $\eta'/A' \approx 1$. Si la solution ne vérifiait pas cette condition, il faudrait changer le choix d'échelle en z', ce qui changerait éventuellement les termes qui peuvent être négligés. On choisit par ailleurs une longueur d'onde caractéristique L' dans la direction x'. L'étude des équations linéarisées introduit une célérité caractéristique c'_0 (qui est la célérité des ondes de grande longueur d'onde, c'est-à-dire dont le vecteur d'onde tend vers 0). On utilise L' et c'_0 pour définir un temps caractéristique $t'_0 = L'/c'_0$ que l'on utilisera pour mesurer les temps.

On travaille donc avec les variables sans dimension suivantes

$$t = \frac{t'}{t'_0} \quad , \quad x = \frac{x'}{L'} \quad , \quad z = \frac{z'}{L'} \quad , \quad \eta = \frac{\eta'}{A'} \quad , \tag{A.18}$$

et on définit

$$u = \frac{u'}{A'/t'_0} \quad , \quad w = \frac{w'}{A'/t'_0} \quad , \quad p = \frac{p'}{\rho A' L'/{t'_0}^2} \quad , \tag{A.19}$$

qui sont des quantités sans dimension. Il est important de noter que l'on mesure *la position* (y compris l'altitude) avec la longueur caractéristique L' mais les *déplacements* du fluide avec la longueur A'. Enfin, on introduit les nombres sans dimension

$$F = \frac{g{t'_0}^2}{L'} \text{ (nombre de Froude)} \quad , \quad \varepsilon = \frac{A'}{L'} \quad \text{et} \quad \delta = \frac{h'}{L'} \quad . \tag{A.20}$$

En reportant dans les équations de définition du problème on parvient au système d'équations suivant :

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \varepsilon\Big(u\frac{\partial u}{\partial x} + w\frac{\partial u}{\partial z}\Big) = -\frac{\partial p}{\partial x} \quad , \tag{A.21}$$

$$\frac{\partial w}{\partial t} + \varepsilon\Big(u\frac{\partial w}{\partial x} + w\frac{\partial w}{\partial z}\Big) = -\frac{\partial p}{\partial z} \quad , \tag{A.22}$$

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0 \quad , \tag{A.23}$$

$$w = 0 \qquad \text{en} \quad z = 0 \quad , \tag{A.24}$$

$$w = \frac{\partial \eta}{\partial t} + \varepsilon u \frac{\partial \eta}{\partial x} \qquad \text{en} \quad z = \delta + \varepsilon\eta \quad , \tag{A.25}$$

$$F\eta = p \qquad \text{en} \quad z = \delta + \varepsilon\eta \quad . \tag{A.26}$$

Nous nous limiterons de plus à un *écoulement irrotationnel*, ce qui a deux conséquences :

1. Le rotationnel de la vitesse ($\overrightarrow{\text{rot}}\,\vec{v}$) étant nul, on a

$$\frac{\partial u}{\partial z} - \frac{\partial w}{\partial x} = 0 \quad . \tag{A.27}$$

2. On peut définir un potentiel des vitesses $\phi(x, z, t)$ tel que $u = \partial\phi/\partial x$ et $w = \partial\phi/\partial z$.

En reportant l'expression de p tirée de l'équation (A.26) dans l'équation (A.21) et en remplaçant $\partial u/\partial z$ par $\partial w/\partial x$ grâce à l'équation (A.27), on obtient une nouvelle forme de la condition à la limite de surface qui nous sera utile par la suite

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \varepsilon\Big(u\frac{\partial u}{\partial x} + w\frac{\partial w}{\partial x}\Big) + F\frac{\partial \eta}{\partial x} = 0 \quad . \tag{A.28}$$

A.2.4 Hypothèses d'échelle

La limite $\varepsilon \to 0$ correspond au cas linéaire. On se propose d'aller au-delà de cette limite en restant toutefois dans le cas de *faibles non-linéarités*. On fait donc l'hypothèse $\varepsilon \ll 1$ mais non nul.

On étudie le cas des *ondes en eau peu profonde* en imposant $\delta = h'/L' \ll 1$ c'est-à-dire que la profondeur est supposée faible devant l'extension spatiale caractéristique de l'onde.

Les paramètres ε et δ sont donc deux *« petits paramètres » indépendants :* δ est fixé par les caractéristiques du système (par exemple la profondeur d'un canal) tandis que ε est fixé par les conditions initiales choisies.

Pour faire des développements cohérents on doit néanmoins *fixer l'échelle relative de ces petits paramètres*. C'est souvent une étape difficile dans la définition des approximations. On fera les calculs avec

$$\varepsilon \sim \delta^2 \quad , \tag{A.29}$$

qui signifie que ε et δ^2 ont des ordres de grandeur comparables mais ne sont cependant pas égaux puisque ce sont *a priori* des paramètres indépendants. *On conduira les calculs jusqu'à l'ordre* $\varepsilon\delta$ ou δ^3.

Il est commode de mesurer le déplacement η de la surface en unités de δ en posant $\varphi = \eta/\delta$. Cela donne pour l'altitude de la surface $z = \delta(1 + \varepsilon\varphi)$ alors que l'équation (A.28) devient :

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \varepsilon\Big(u\frac{\partial u}{\partial x} + w\frac{\partial w}{\partial x}\Big) + F\delta\frac{\partial \varphi}{\partial x} = 0 \quad . \tag{A.30}$$

On suppose φ d'ordre 1, soit $\eta'/h' = \varepsilon\varphi$ d'ordre ε, ce qui correspond bien à une faible non-linéarité.

A.2.5 Le potentiel des vitesses

L'hypothèse de l'écoulement irrotationnel permet de travailler avec le potentiel des vitesses, ce qui rendra les calculs possibles même dans le cas non-linéaire. En fonction du potentiel des vitesses, la condition d'incompressibilité (A.23) donne

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} = 0 \quad . \tag{A.31}$$

L'hypothèse « eau peu profonde », soit $z \sim \delta$, conduit à rechercher une solution de l'équation de Laplace (A.31) sous la forme d'un développement en z :

$$\phi(x, z, t) = \sum_{n=0}^{\infty} z^n \phi_n(x, t) \quad . \tag{A.32}$$

En reportant dans l'équation de Laplace on obtient :

$$\sum_{n=0}^{\infty} z^n \left(\frac{\partial^2 \phi_n}{\partial x^2} + (n+2)(n+1)\phi_{n+2}\right) = 0 \quad . \tag{A.33}$$

Comme cette équation doit être vérifiée pour tout z dans le domaine du fluide, on en déduit une relation de récurrence entre les ϕ_n :

$$\phi_{n+2} = -\frac{1}{(n+2)(n+1)}\frac{\partial^2 \phi_n}{\partial x^2} \quad . \tag{A.34}$$

La condition à la limite au fond $w(z=0)=0$ donne $\partial\phi/\partial z = 0$ en $z=0$, donc $\phi_1(x,t)=0$, ce qui entraîne que tous les ϕ_{2p+1} sont nuls. Il reste donc

$$\phi(x,z,t) = \phi_0(x,t) - \frac{1}{2}z^2\frac{\partial^2\phi_0}{\partial x^2} + \frac{1}{24}z^4\frac{\partial^4\phi_0}{\partial x^4} + \dots \quad , \tag{A.35}$$

d'où l'on peut tirer u et w

$$u = \frac{\partial\phi}{\partial x} = \frac{\partial\phi_0}{\partial x} - \frac{1}{2}z^2\,\frac{\partial^3\phi_0}{\partial x^3} + \frac{1}{24}z^4\,\frac{\partial^5\phi_0}{\partial x^5} + \dots \quad , \tag{A.36}$$

$$w = \frac{\partial\phi}{\partial z} = -z\,\frac{\partial^2\phi_0}{\partial x^2} + \frac{1}{6}z^3\,\frac{\partial^4\phi_0}{\partial x^4} + \dots \quad . \tag{A.37}$$

Par la suite, on notera $\partial\phi_0/\partial x = f(x,t)$. D'autre part, on a $z \sim \delta$ de sorte que, comme on limite les développements à l'ordre δ^3, nous nous limiterons simplement à :

$$u(x,z,t) = f(x,t) - \frac{1}{2}z^2 f_{xx} \quad , \tag{A.38}$$

$$w(x,z,t) = -zf_x + \frac{1}{6}z^3 f_{xxx} \quad . \tag{A.39}$$

A.3 Étude de la limite linéaire

Il est utile de revenir temporairement à la limite linéaire qui permet de faire le choix de la vitesse caractéristique c_0 qui figure dans le passage aux équations sans dimensions.

Dans cette limite $\varepsilon = 0$ donc $z_{\text{surface}} = \delta + \varepsilon\eta \simeq \delta$, ce qui donne à la surface $w \simeq -\delta f_x$ et $u \simeq f$ (à l'ordre δ^2 près). La condition cinématique à la surface se réduit par conséquent à :

$$w = \frac{\partial\eta}{\partial t} = \delta\frac{\partial\varphi}{\partial t} \quad . \tag{A.40}$$

La condition à la limite (A.28) se simplifie en :

$$\frac{\partial u}{\partial t} + F\delta\,\frac{\partial\varphi}{\partial x} = 0 \quad . \tag{A.41}$$

En fonction de la variable f, ces équations donnent $-\delta f_x = \delta\varphi_t$, d'où $f_{xx} = -\varphi_{xt}$ et $f_t = -F\delta\varphi_x$, d'où $f_{tt} = -F\delta\,\varphi_{xt} = F\delta f_{xx}$. À la limite linéaire l'équation vérifiée par f à la surface est donc :

$$\frac{1}{F\delta}f_{tt} - f_{xx} = 0 \quad , \tag{A.42}$$

dont les solutions linéaires sont des *ondes non dispersives* se propageant à la célérité $c = \sqrt{F\delta}$. Cette vitesse caractéristique pour les ondes de faible

amplitude permet de choisir la vitesse c'_0 qui a servi à définir le temps caractéristique t'_0 que nous utilisons. La vitesse adimensionnée c, qui est le rapport entre une variation de coordonnée Δx et un intervalle de temps Δt est reliée à la vitesse dimensionnée des ondes linéaires par :

$$c = \frac{\Delta x}{\Delta t} = \frac{\Delta x'/L'}{\Delta t'/t'_0} = \frac{\Delta x'/L'}{c'_0\,\Delta t'/L'} = \frac{c'_{\text{lin}}}{c'_0} \quad . \tag{A.43}$$

Compte tenu des définitions de F et δ et de $c'_0\,t'_0 = L'$, on obtient ${c'_{\text{lin}}}^2 = {c'_0}^2 c^2 = F\delta\,{c'_0}^2 = g\,{t'_0}^2\;h'/L'^2{c'_0}^2 \;= gh'$.

Dans la suite, on choisira $c'_0 = c'_{\text{lin}} = \sqrt{gh'}$, ce qui revient à avoir $F\delta = 1$ avec ce choix particulier d'échelles, et simplifie l'expression de la condition à la limite (A.30).

A.4 L'équation non-linéaire en eau peu profonde

Dans le cas non-linéaire, la démarche est analogue à celle suivie dans le cas linéaire : on exprime d'abord u et w à la surface en fonction de f, puis on reporte dans les conditions aux limites cinématique et physique à la surface (la condition au fond ayant déjà été utilisée quand on a exprimé u et w en fonction du potentiel des vitesses). On garde les termes jusqu'à l'ordre $\varepsilon\delta$ ou δ^3.

Avec $z_{\text{surface}} = \delta(1 + \varepsilon\varphi)$, on obtient à partir des équations (A.38) et (A.39) :

$$u_{\text{surface}} = f - \frac{1}{2}\,\delta^2\,f_{xx} \tag{A.44}$$

$$w_{\text{surface}} = -\delta\,(1+\varepsilon\varphi)f_x + \frac{1}{6}\,\delta^3\,f_{xxx} \quad . \tag{A.45}$$

Avec $\eta = \delta\varphi$, la condition à la limite cinématique (A.25) donne :

$$w_{\text{surface}} = \delta\,\frac{\partial\varphi}{\partial t} + \varepsilon\,\delta\;u_{\text{surface}}\,\frac{\partial\varphi}{\partial x} \quad . \tag{A.46}$$

On introduit u_{surface} tiré de (A.44) dans l'équation précédente et, puisqu'il est précédé d'un facteur ε, on peut se limiter ici à $u_{\text{surface}} = f$ compte tenu de l'ordre en ε et δ auquel on fait le calcul. Ce qui donne :

$$w_{\text{surface}} = \delta\varphi_t + \varepsilon\delta f\varphi_x \quad . \tag{A.47}$$

L'égalité des expressions (A.45) et (A.47) de w_{surface} conduit à une relation entre f et φ,

$$\varphi_t + f_x + \varepsilon\varphi f_x + \varepsilon f\varphi_x - \frac{1}{6}\,\delta^2 f_{xxx} = 0 \quad . \tag{A.48}$$

L'étape suivante consiste à utiliser la condition à la limite physique (A.30) (avec $F\delta = 1$). Cette expression se simplifie car $w \simeq \delta$, donc $\varepsilon w(\partial w/\partial x) \simeq \varepsilon\delta^2$ est d'ordre supérieur aux termes que l'on conserve et peut être négligé. Dans le terme $\varepsilon u(\partial u/\partial x)$, on utilise seulement $u = f$ pour rester à l'ordre retenu dans les calculs. On obtient donc :

$$f_t - \frac{1}{2}\delta^2 f_{xxt} + \varepsilon f f_x + \varphi_x = 0 \quad . \tag{A.49}$$

Les équations (A.44), (A.45), (A.48) et (A.49) constituent le système d'équations non-linéaires décrivant les ondes en eau peu profonde.

On résout d'abord le système (A.48) et (A.49) en $f(x,t)$ et $\varphi(x,t)$ par un développement perturbatif.

1. À l'ordre 0 en ε et δ, le système (A.48) et (A.49) se réduit à

$$\varphi_t + f_x = 0 \quad \text{et} \quad f_t + \varphi_x = 0 \tag{A.50}$$

qui admet la solution $f = \varphi$ à condition que l'on impose $f_t + f_x = 0$.

2. À l'ordre ε, δ^2, on cherche la solution sous la forme :

$$f = \varphi + \varepsilon\alpha + \delta^2\beta \quad , \tag{A.51}$$

où $\alpha(x,t)$ et $\beta(x,t)$ sont des fonctions à déterminer auxquelles on impose la condition sur f déduite de l'ordre 0, c'est-à-dire :

$$\alpha_t+\alpha_x = 0+\mathcal{O}(\varepsilon,\delta^2), \quad \beta_t+\beta_x = 0+\mathcal{O}(\varepsilon,\delta^2) \quad \text{et} \quad \varphi_t+\varphi_x = 0+\mathcal{O}(\varepsilon,\delta^2) \tag{A.52}$$

où $\mathcal{O}(\varepsilon,\delta^2)$ désigne des quantités de l'ordre de grandeur de ε ou δ^2.

En reportant dans (A.48) et en se limitant toujours à l'ordre ε ou δ^2, on a

$$\varphi_t + \varphi_x + \varepsilon\alpha_x + \delta^2\beta_x + 2\varepsilon\varphi\varphi_x - \frac{1}{6}\delta^2\varphi_{xxx} = 0 \quad . \tag{A.53}$$

En reportant dans (A.49), il vient :

$$\varphi_t + \varepsilon\alpha_t + \delta^2\beta_t + \varphi_x + \varepsilon\varphi\varphi_x - \frac{1}{2}\delta^2\varphi_{xxt} = 0 \quad . \tag{A.54}$$

En soustrayant (A.54) de (A.53) on arrive à :

$$\varepsilon\big(\alpha_x - \alpha_t\big) + \delta^2\big(\beta_x - \beta_t\big) + \varepsilon\varphi\varphi_x - \frac{1}{6}\delta^2\,\varphi_{xxx} + \frac{1}{2}\delta^2\,\varphi_{xxt} = 0 \quad . \tag{A.55}$$

En tenant compte des relations (A.52), on obtient :

$$\varepsilon\big(2\alpha_x + \varphi\varphi_x\big) + \delta^2\big(2\beta_x - \frac{2}{3}\varphi_{xxx}\big) = 0 \quad . \tag{A.56}$$

Or, bien qu'ils aient le même ordre de grandeur, ε et δ^2 sont deux paramètres indépendants puisque ε est déterminé par la condition initiale tandis que δ est déterminé par les caractéristiques du système et notamment sa profondeur. L'équation (A.56) ne peut être satisfaite pour tout couple (ε, δ^2) que si l'on a :

$$2\alpha_x + \varphi\varphi_x = 0 \quad \text{et} \quad 2\beta_x - \frac{2}{3}\varphi_{xxx} = 0 \quad . \tag{A.57}$$

Ceci conduit après intégration spatiale à

$$\alpha = -\frac{1}{4}\varphi^2 + C_1(t) \quad \text{et} \quad \beta = \frac{1}{3}\varphi_{xx} + C_2(t) \quad , \tag{A.58}$$

où $C_1(t)$ et $C_2(t)$ sont fonctions du temps seulement. On parvient donc à une expression de la fonction f qui permet de calculer le potentiel des vitesses en fonction de φ qui donne l'équation de la surface :

$$f = \varphi - \frac{\varepsilon}{4}\varphi^2 + \frac{\delta^2}{3}\varphi_{xx} + \varepsilon\, C_1(t) + \delta^2 C_2(t) \quad . \tag{A.59}$$

Cette équation relie donc la dynamique du fluide à la condition à la limite φ que l'on cherche à déterminer. C'est cet aspect qui fait la difficulté du problème : *on cherche à résoudre les équations de la dynamique du fluide dans un domaine dont une des limites est une inconnue du problème, qui est précisément déterminée par la dynamique du fluide*. Le problème doit donc être résolu de manière autocohérente. Mais il est maintenant possible de parvenir à une équation en φ en reportant l'expression de f dans l'équation (A.48), qui donne, toujours au même ordre d'approximation :

$$\varphi_t + \varphi_x + \frac{3}{2}\varepsilon\varphi\varphi_x + \frac{1}{6}\delta^2\varphi_{xxx} = 0 \quad . \tag{A.60}$$

On est ainsi parvenu à une équation non-linéaire qui décrit le mouvement de la surface dans le cas d'ondes en eau peu profonde. Elle prend une forme plus simple si on l'écrit dans le repère mobile à la vitesse 1 (ce qui, en variables dimensionnées correspond au repère mobile à la vitesse $c'_0 = \sqrt{gh'}$).

Dans ce repère les variables sont $\xi = x - t$, $\tau = t$ soit $\partial/\partial x = \partial/\partial\xi$ et $\partial/\partial t = \partial/\partial\tau - \partial/\partial\xi$ de sorte que $\varphi_t + \varphi_x$ se réduit à φ_τ. L'équation devient

$$\boxed{\varphi_\tau + \frac{3}{2}\,\varepsilon\,\varphi\varphi_\xi + \frac{1}{6}\delta^2\varphi_{\xi\xi\xi} = 0} \tag{A.61}$$

qui est l'équation établie par Korteweg et de Vries en 1895.

Le chemin qui y conduit semble long car nous avons détaillé les étapes. On peut trouver des solutions « élégantes » pour établir rapidement l'équation KdV, mais le prix à payer est que l'on ne contrôle pas les approximations. Pour parvenir à cette équation il a fallu en effet faire des approximations qui semblent nombreuses mais en fait reposent toutes sur la même condition

$\varepsilon \simeq \delta^2 \ll 1$. Cette hypothèse est en général bien vérifiée expérimentalement car les ondes solitaires que l'on observe sont très étendues spatialement par rapport à leur amplitude (condition $\varepsilon = A'/L' \ll 1$) et les observations sont bien réalisées en eau peu profonde ($\delta^2 = (h'/L')^2 \ll 1$). C'est pourquoi l'équation KdV s'est révélée si fructueuse pour l'analyse des ondes hydrodynamiques en eau peu profonde, comme par exemple les solitons observés dans la mer d'Andaman.

Appendice B

Formulation lagrangienne et hamiltonienne d'un système continu

LA PLUPART DES SYSTÈMES qui possèdent des excitations de type soliton sont des systèmes continus. La formulation lagrangienne ou hamiltonienne de la mécanique des systèmes discrets [64] doit être étendue pour traiter de tels systèmes. Nous rappelons dans cette annexe les principaux résultats de la mécanique analytique des milieux continus, en nous limitant à un milieu unidimensionnel pour simplifier les expressions sans nuire à la généralité.

B.1 Formulation lagrangienne

Considérons un système continu caractérisé par le champ $\eta(x,t)$, qui pourrait par exemple être le champ de déplacement d'une corde vibrante. On introduit une quantité $\mathcal{L}$ appelée densité lagrangienne du système. En général $\mathcal{L}$ dépend non seulement du champ η et de sa dérivée temporelle η_t, de même que le lagrangien pour une particule dépend de sa position et de sa vitesse, mais aussi de la dérivée spatiale η_x, et éventuellement explicitement des variables indépendantes x et t :

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}\left(\eta, \frac{\mathrm{d}\eta}{\mathrm{d}x}, \frac{\mathrm{d}\eta}{\mathrm{d}t}, x, t\right) \quad . \tag{B.1}$$

Le lagrangien total L est l'intégrale de $\mathcal{L}$ sur le domaine de variation $[x_1, x_2]$ de la variable spatiale x

$$L = \int_{x_1}^{x_2} \mathrm{d}x \; \mathcal{L} \quad , \tag{B.2}$$

alors que l'action entre deux instants t_1 et t_2 s'écrit :

$$S = \int_{t_1}^{t_2} \mathrm{d}t \; L = \int_{t_1}^{t_2} \mathrm{d}t \int_{x_1}^{x_2} \mathrm{d}x \; \mathcal{L} \quad . \tag{B.3}$$

Pour déterminer les équations du mouvement on utilise le principe d'Hamilton qui indique que la dynamique du système entre t_1 et t_2, est celle qui extrémalise l'action. Cela signifie que l'intégrale d'action conserve la même valeur, à un infiniment petit d'ordre 1 près, pour tous les « chemins », c'est-à-dire les fonctions $\eta(x,t)$ qui diffèrent par une variation infinitésimale du « chemin » effectivement suivi par le système. Ce qui se traduit par l'expression :

$$\delta S = 0 = \int_{t_1}^{t_2} \mathrm{d}t \int_{x_1}^{x_2} \mathrm{d}x \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \eta} \, \delta\eta + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \eta_t} \, \delta\eta_t + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \eta_x} \, \delta\eta_x \right] \quad . \tag{B.4}$$

Deux intégrations par parties du terme de droite conduisent à :

$$\begin{aligned} \delta S = \int_{t_1}^{t_2} \mathrm{d}t \int_{x_1}^{x_2} \mathrm{d}x \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \eta} \, \delta\eta \right] + \int_{x_1}^{x_2} \mathrm{d}x \left(\left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \eta_t} \, \delta\eta \right]_{t_1}^{t_2} - \int_{t_1}^{t_2} \mathrm{d}t \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \eta_t} \right) \, \delta\eta \right) \\ + \int_{t_1}^{t_2} \mathrm{d}t \left(\left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \eta_x} \, \delta\eta \right]_{x_1}^{x_2} - \int_{x_1}^{x_2} \mathrm{d}x \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \eta_x} \right) \, \delta\eta \right) \quad . \end{aligned} \tag{B.5}$$

Cette extrémalisation se fait avec des conditions aux extrémités données, ce qui signifie que $\delta\eta$ est nul aux extrémités 1 et 2. L'expression de δS se simplifie donc en :

$$\delta S = 0 = \int_{t_1}^{t_2} \mathrm{d}t \int_{x_1}^{x_2} \mathrm{d}x \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \eta} - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \eta_t} \right) - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \eta_x} \right) \right] \delta\eta \quad . \tag{B.6}$$

Comme la condition d'extrémalisation doit être vérifiée pour *toute variation* $\delta\eta$, l'équation (B.6) ne peut être satisfaite que si le crochet est nul, ce qui conduit à l'équation de Lagrange :

$$\boxed{\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \eta_t} \right) + \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \eta_x} \right) = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \eta}} \quad . \tag{B.7}$$

Alors qu'un système ayant N degrés de liberté aurait conduit à N équations de Lagrange, il n'y a donc qu'une seule équation de Lagrange correspondant à un système continu possédant pourtant une infinité de degrés de liberté. Ce paradoxe n'est bien évidemment qu'apparent puisque l'équation de Lagrange (B.7) est une équation aux dérivées partielles des *deux* variables x et t alors que les N équations de Lagrange d'un système discret sont des équations différentielles de l'*unique* variable temporelle t.

Il n'y a aucune difficulté à généraliser cette formulation hamiltonienne à plus d'une dimension spatiale. Il est par ailleurs intéressant de remarquer que

les variables temporelle t, et spatiales x, y et z jouent un rôle identique dans le principe d'Hamilton et dans les équations de Lagrange.

Dans les cas où la densité lagrangienne dépend de dérivées d'ordre supérieur, il faut compléter l'équation de Lagrange (B.7). C'est notamment le cas pour le lagrangien (1.24) de l'équation de KdV. En effectuant une double intégration par parties, on montre de la même façon que précédemment que la densité lagrangienne $\mathcal{L}\,(\eta, \eta_x, \eta_t, \eta_{xx}, x, t)$ conduit à l'équation de Lagrange :

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \eta_t}\right) + \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \eta_x}\right) - \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \eta_{xx}}\right) = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \eta} \quad . \tag{B.8}$$

On notera le signe $-$ devant le terme en $\mathrm{d}^2/\mathrm{d}x^2$ dont il est facile de se souvenir en notant que chaque intégration par parties introduit un changement de signe.

B.2 Formulation hamiltonienne

Disposant d'un lagrangien, on peut définir un hamiltonien H, ou bien une densité hamiltonienne $\mathcal{H}$. Il faut au préalable définir une densité d'impulsion canonique π, variable conjuguée de η :

$$\pi = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \eta_t} \quad . \tag{B.9}$$

On obtient alors la densité hamiltonienne $\mathcal{H}$ directement grâce à la transformation canonique :

$$\boxed{\mathcal{H}(\eta, \pi, x, t) = \pi \frac{\mathrm{d}\eta}{\mathrm{d}t} - \mathcal{L}} \quad . \tag{B.10}$$

Ici, contrairement à ce que nous avons vu dans la formulation lagrangienne, la variable temporelle joue un rôle particulier et on perd donc la symétrie entre la variable temporelle et les variables spatiales dans les équations.

L'hamiltonien s'obtient ensuite par intégration sur la variable spatiale

$$H = \int_{x_1}^{x_2} \mathrm{d}x \; \mathcal{H} = \int_{x_1}^{x_2} \mathrm{d}x \left(\pi \frac{\mathrm{d}\eta}{\mathrm{d}t} - \mathcal{L}\right) \quad , \tag{B.11}$$

et on peut en dériver les équations du mouvement, appelés équations d'Hamilton.

La définition de la densité hamiltonienne (B.10) donne directement la première équation :

$$\boxed{\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \pi} = \frac{\mathrm{d}\eta}{\mathrm{d}t}} \quad . \tag{B.12}$$

La seconde s'obtient moins directement. De même que lorsqu'on cherche l'équation du mouvement d'une particule, on doit chercher séparément la position et la vitesse qui sont à traiter comme variables indépendantes, dans

la méthode variationnelle, dans le cas d'un milieu continu, η et π sont deux quantités que l'on doit traiter comme indépendantes. Cela implique :

$$\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \eta} = 0 + 0 - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \eta} \tag{B.13}$$

$$= -\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \underbrace{\left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \eta_t}\right)}_{=\pi} - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \eta_x}\right) \quad , \tag{B.14}$$

en utilisant l'équation de Lagrange (B.7). On a par ailleurs :

$$\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \eta_x} = -\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \eta_x} \quad . \tag{B.15}$$

En regroupant les équations (B.14) et (B.15), on aboutit finalement à :

$$\boxed{\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \eta} - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left(\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \eta_x}\right) = -\frac{\mathrm{d}\pi}{\mathrm{d}t}} \tag{B.16}$$

qui est la seconde équation d'Hamilton.

Cette dérivation classique utilise l'hypothèse essentielle que la variable η et sa variable conjuguée π ne sont liées que par un opérateur de dérivation et doivent être traitées comme des variables indépendantes dans l'approche variationnelle. L'espace des phases (η, π) est par conséquent défini de manière satisfaisante puisque ses différentes « composantes » sont indépendantes. Si ce n'est pas le cas (cf. section 3.3.2 pour un exemple), les premiers termes de l'équation (B.13) ne s'annulent pas nécessairement ; il faut alors établir les équations d'Hamilton en tenant compte de cette contrainte.

Appendice C

États cohérents de l'oscillateur harmonique

On considère un oscillateur harmonique dont l'hamiltonien, écrit en fonction des opérateurs annihilation a et création $a^\dagger$ est

$$H = a^\dagger a + \frac{1}{2} \quad , \tag{C.1}$$

et possède les états propres $|n\rangle$, associés aux valeurs propres $E_n = n + 1/2$.

Les états cohérents de cet oscillateur sont états propres de l'opérateur annihilation a. Ils sont donc définis par

$$a\,|\alpha\rangle = \alpha\,|\alpha\rangle \quad , \tag{C.2}$$

où α est un nombre complexe puisque l'opérateur a n'est pas hermitique. On peut les obtenir par un développement dans la base $|n\rangle$, mais, comme nous allons le voir, il est aussi possible d'en donner l'expression plus compacte [63] que nous utilisons au chapitre 14.

Pour cela, supposons qu'il existe un opérateur unitaire $D(\beta)$, dépendant d'un scalaire complexe β, tel que

$$D^\dagger(\beta)\ a\ D(\beta) = a + \beta \quad . \tag{C.3}$$

En utilisant l'adjoint cette équation, on obtient directement :

$$D^\dagger(\beta)\ a^\dagger\ D(\beta) = a^\dagger + \beta^\star \quad . \tag{C.4}$$

Propriété

Démontrons la propriété :

$$a\,D^{-1}(\beta)\ |\alpha\rangle = (\alpha - \beta)\,D^{-1}(\beta)\ |\alpha\rangle \tag{C.5}$$

qui signifie que l'opérateur $D^{-1}(\beta)$ transforme l'état cohérent $|\alpha\rangle$ en un autre état cohérent dont la valeur propre est translatée.

Démonstration

Comme D est unitaire par hypothèse, on peut utiliser l'égalité $D^{-1} = D^\dagger$. Par action de D sur l'équation (C.3), on obtient

$$D(\beta)\, D^\dagger(\beta)\ a\ D(\beta) = a\ D(\beta) = D(\beta)\ a + D(\beta)\beta \quad , \tag{C.6}$$

que l'on peut réécrire sous la forme

$$D(\beta)\ a = a\ D(\beta) - \beta D(\beta) \quad . \tag{C.7}$$

En appliquant cet opérateur à $D^{-1}(\beta)\,|\alpha\rangle$, on a :

$$D(\beta)\ a\, D^{-1}(\beta)\,|\alpha\rangle = a\, D(\beta)\, D^{-1}(\beta)\,|\alpha\rangle - \beta D(\beta)\, D^{-1}(\beta)\,|\alpha\rangle \tag{C.8}$$

$$= a\ |\alpha\rangle - \beta|\alpha\rangle \tag{C.9}$$

$$= (\alpha - \beta)\,|\alpha\rangle \quad , \tag{C.10}$$

en utilisant l'équation (C.2). Enfin, en faisant agir l'opérateur $D^{-1}(\beta)$ sur cette expression, on aboutit à

$$D^{-1}(\beta)\, D(\beta)\, a\, D^{-1}(\beta)\,|\alpha\rangle = D^{-1}(\beta)(\alpha - \beta)|\alpha\rangle \tag{C.11}$$

qui démontre la propriété (C.5).

Conséquence

Dans le cas particulier où $\alpha = \beta$, on obtient $aD^{-1}(\alpha)\,|\alpha\rangle = |0\rangle$. Comme l'état propre $|0\rangle$, n'est pas dégénéré, cela signifie que l'on a l'égalité $D^{-1}(\alpha)\,|\alpha\rangle = C|0\rangle$ où C est une constante à déterminer. On obtient donc $|\alpha\rangle = C\,D(\alpha)\,|0\rangle$. Comme les états $|\alpha\rangle$ et $|0\rangle$ sont normés et que l'opérateur D est unitaire, cela signifie que la constante C est égale à 1. Par conséquent, on a l'égalité :

$$|\alpha\rangle = D(\alpha)|0\rangle \quad . \tag{C.12}$$

Cette expression est intéressante car elle fournit une méthode pour générer $|\alpha\rangle$ de manière systématique, pourvu que l'on dispose de l'opérateur $D(\alpha)$.

Afin d'obtenir cet opérateur D qui est défini par l'équation (C.3), nous allons nous intéresser au cas particulier d'un opérateur D portant sur un déplacement infinitésimal $\mathrm{d}\alpha$, en nous limitant au premier ordre. On peut vérifier que :

$$D(\mathrm{d}\alpha) = 1 + a^\dagger\,\mathrm{d}\alpha - a\,\mathrm{d}\alpha^\star \quad . \tag{C.13}$$

En effet, cette expression conduit à

$$a\,D(\mathrm{d}\alpha) = a + a\,a^\dagger\,\mathrm{d}\alpha - a^2\,\mathrm{d}\alpha^\star \quad , \tag{C.14}$$

et par conséquent, en tenant compte de $D^\dagger = 1 + a\,\mathrm{d}\alpha^\star - a^\dagger\,\mathrm{d}\alpha$ qui se déduit directement de (C.13),

$$D^\dagger(\mathrm{d}\alpha)\,a\,D(\mathrm{d}\alpha) = (1 + a\,\mathrm{d}\alpha^\star - a^\dagger\,\mathrm{d}\alpha)(a + a\,a^\dagger\,\mathrm{d}\alpha - a^2\,\mathrm{d}\alpha^\star) \qquad (C.15)$$

$$= a + a\,a^\dagger\,\mathrm{d}\alpha - a^2\,\mathrm{d}\alpha^\star + a^2\,\mathrm{d}\alpha^\star - a^\dagger\,a\,\mathrm{d}\alpha + \mathcal{O}\,(\mathrm{d}\alpha^2) \qquad (C.16)$$

$$= a + [a, a^\dagger]\,\mathrm{d}\alpha + \mathcal{O}\,(\mathrm{d}\alpha^2) \qquad (C.17)$$

$$= a + \mathrm{d}\alpha \quad , \qquad (C.18)$$

puisque $[a, a^\dagger] = 1$. Cette relation démontre donc bien que l'expression (C.13) est l'opérateur D défini par l'équation (C.3) qui correspond à la translation infinitésimale $\mathrm{d}\alpha$.

On peut en déduire une équation différentielle donnant l'opérateur $D(\alpha)$, en considérant une variation de α obtenue par la multiplication par le réel λ :

$$D\big((\lambda + \mathrm{d}\lambda)\alpha\big) = D(\alpha \mathrm{d}\lambda)\ D(\alpha\lambda) \qquad (C.19)$$

$$= (1 + a^\dagger \mathrm{d}\lambda\alpha - a\mathrm{d}\lambda\alpha^\star)\ D(\alpha\lambda) \quad , \qquad (C.20)$$

qui conduit à

$$\frac{D\big((\lambda + \mathrm{d}\lambda)\alpha\big) - D(\alpha\lambda)}{\mathrm{d}\lambda} = \alpha\,a^\dagger - \alpha^\star\,a \quad . \qquad (C.21)$$

L'intégration de cette expression par rapport à la variable λ puis l'évaluation de la solution pour $\lambda = 1$, donne l'expression cherchée pour D,

$$D(\alpha) = \exp\big(\alpha\,a^\dagger - \alpha^\star\,a\big) \quad . \qquad (C.22)$$

En utilisant l'équation (C.12), on obtient par conséquent l'expression de l'état cohérent :

$$|\alpha\rangle = e^{(\alpha\,a^\dagger\, -\, \alpha^\star\,a)}\ |0\rangle \quad . \qquad (C.23)$$

Par ailleurs, les expressions des opérateurs position X et quantité de mouvement P en fonction de a et $a^\dagger$, donnent immédiatement pour un état cohérent $|\alpha\rangle$, les deux égalités :

$$\langle\alpha|X|\alpha\rangle = \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}}\ \mathrm{Re}(\alpha) \qquad (C.24)$$

$$\langle\alpha|P_x|\alpha\rangle = \sqrt{2m\omega\hbar}\ \mathrm{Im}(\alpha) \quad , \qquad (C.25)$$

que nous avons utilisées dans le chapitre 14.

Table des portraits

Bibliographie

Nous avons distingué les ouvrages consacrés aux solitons des autres livres et des articles de recherche. Ces derniers sont donc précisés dans un deuxième temps et triés par ordre alphabétique.

Livres sur les solitons

[1] ABLOWITZ M.J., SEGUR H., *Solitons and the Inverse Scattering Transform*, Studies in Applied Mathematics (SIAM) **4**, Society for Industrial and Applied Mathematics, Philadelphie (1981).

[2] BRAUN O.M., KIVSHAR Y.S., *The Frenkel-Kontorova Model. Concepts, Methods and Applications*, Springer (2004).

[3] DODD R.K., EILBECK J.C., GIBBON J.D., MORRIS H.C., *Solitons and Nonlinear Wave Equations*, Academic (1982).

[4] DRAZIN P.G., JOHNSON R.S., *Solitons: an Introduction*, Cambridge University Press (1993).

[5] EILENBERGER G., *Solitons: Mathematical Methods for Physicists*, Springer (1981).

[6] INFELD E., ROWLANDS G., *Nonlinear Waves, Solitons and Chaos*, Cambridge University Press (1990).

[7] LAMB G.L., *Elements of Soliton Theory*, John Wiley, New York (1980).

[8] NEWELL A.C., *Solitons in Mathematics and Physics*, SIAM, Philadelphie (1985).

[9] REMOISSENET M., *Waves Called Solitons*, Springer (1996).

[10] SCOTT A.C., *Nonlinear Science*, Oxford University Press (1999).

[11] TODA M., *Theory of Nonlinear Lattices*, Springer (1978).

Livres et articles de recherche

[12] ABLOWITZ M.J., KAUP D.J., NEWELL A.C., SEGUR H., « The inverse scattering transform-Fourier analysis for nonlinear problems », *Studies in Applied Mathematics* **53**, 249-315 (1974).

[13] ABRAMOWITZ M., STEGUN I.A., *Handbook of Mathematical Functions*, Dover (1965).

[14] AGRAWAL G.P., *Nonlinear Fiber Optics*, Academic Press (2001).

[15] ALLEN M.P., Tildesley D.J., *Computer Simulations of Liquids*, Clarendon, Oxford (1987).

[16] ASANO T., NOJIRI H., INAGAKI Y., BOUCHER J.P., SAKON T., AJIRO Y., MOTOKAWA M., « ESR investigation on the breather mode and the spinon-breather dynamical crossover in *Cu* benzoate », *Physical Review Letters* **84**, 5880-5883 (2000).

[17] ASHCROFT N.W., MERMIN N.D., *Solid State Physics*, Holt-Saunders International Editions (1976).

[18] AUBRY S., « A unified approach to the interpretation of displacive and order-disorder systems: I. Thermodynamical aspect », *Journal of Chemical Physics* **62**, 3217-3229 (1975).

[19] AUBRY S., « A unified approach to the interpretation of displacive and order-disorder systems: II. Displacive systems », *Journal of Chemical Physics* **62**, 3392-3402 (1976).

[20] AUBRY S., « The new concept of Transition by breaking of analyticity in a crystallographic mode », in *Solitons and Condensed Matter*, A.R. Bishop, T. Schneider (Eds.), Springer, 264-277 (1978).

[21] AUBRY S., « Structure incommensurables et brisure de la symétrie de translation », in *Structures et Instabilités*, C. Godrèche (Éd.), EDP Sciences, Paris (1986).

[22] BARONE A., PATERNO G., *Physics and Applications of the Josephson Effect*, Wiley (1982).

[23] BAZIN H., « Recherches expérimentales relatives aux remous et à la propagation des ondes », in *Recherches Hydrauliques*, H. Darcy, H. Bazin, Imprimerie Impériale, Paris (1865).

[24] BENJAMIN T.B., FEIR J.F., « The disintegration of wave trains on deep water », *Journal of Fluid Mechanics* **27**, 417-430 (1967).

[25] BENJAMIN T.B., BONA J.L., MAHONY J.J., « Model equations for long waves in nonlinear dispersive systems », *Philosophical Transaction of the Royal Society of London* **272**, 47-48 (1972).

[26] BLACKBURN J.A., SMITH H.J.T., « Experimental study of an inverted pendulum », *American Journal of Physics* **60**, 909-911 (1992).

[27] BLACKBURN J.A., SMITH H.J.T., GRONBECH-JENSEN N., « Stability and Hopf bifurcations in an inverted pendulum », *American Journal of Physics* **60**, 903-908 (1992).

[28] BOESCH R., STANCIOFF P., WILLIS C.R., « Hamiltonian equations for multiple-collective-variable theories of nonlinear Klein-Gordon

equations: a projector operator approach », *Physical Review B* **38**, 6713-6735 (1988).

[29] BOLTON P.H., JAMES T.L., « Fast and slow conformational fluctuations of RNA and DNA – sub-nanosecond internal motion correlation times determined by P-31-NMR », *Journal of the American Chemical Society* **102**, 25-31 (1980).

[30] BOUCHER J.P., « Nonlinear soliton excitations in antiferromagnetic chains », *Hyperfine Interactions* **49**, 423-438 (1989).

[31] BOUSSINESQ J., « Théorie des ondes et des remous qui se propagent le long d'un canal rectangulaire horizontal, en communiquant au liquide contenu dans ce canal des vitesses sensiblement pareilles de la surface au fond », *Journal de Mathématiques Pures et Appliquées* **17**, 55-108 (1872).

[32] BUELL W.F., SHADWICK B.A., « Potentials and bound states », *American Journal of Physics* **63**, 256-258 (1995).

[33] CAMPBELL D.K., PEYRARD M., SODANO P., « Kink-antikink interactions in the double sine-Gordon equation », *Physica D* **19**, 165-205 (1986).

[34] CAMPBELL D.K., SCHONFELD J.F., WINGATE C.A., « Resonance structure in kink-antikink interactions in ϕ^4 theory », *Physica D* **9**, 1-32 (1983).

[35] CARERI G., BUONTEMPO U., GALLUZI F., SCOTT A.C., GRATTON E. SHYAMSUNDER E., « Spectroscopic evidence for Davydov-like solitons in acetanilide », *Physical Review B* **30**, 4689 (1984).

[36] COHEN-TANNOUDJI C., DIU B., LALOË F., *Mécanique quantique*, Hermann, Paris, t. 1, chap. 4, complément G (1977).

[37] CONDAT C.A., GUYER R.A., MILLER M.D., « Double sine-Gordon chain », *Physical Review B* **27**, 474 (1983).

[38] COURANT R., HILBERT D., *Methods of Mathematical Physics*, Wiley (1962).

[39] DASHEN R.F., HASSLACHER B., NEVEU A., « Non perturbative methods and extended-hadron models in field theory: II. Two dimensional models and extended hadrons », *Physical Review D* **10**, 4130-4138 (1974).

[40] DAUXOIS T., PEYRARD M., BISHOP A.R., « Entropy driven DNA denaturation », *Physical Review E* **47**, Rapid Communication, R44-R47 (1993).

[41] DAUXOIS T., THEODORAKOPOULOS N., PEYRARD M., « Thermodynamic instabilities in one dimension: correlations, scaling and solitons », *Journal of Statistical Physics* **107**, 869-891 (2002).

[42] DAVYDOV A.S., « The theory of contraction of proteins under their excitation », *Journal of Theoretical Biology* **38**, 559-569 (1973).

[43] DE BOUARD A., GHIDAGLIA J.-M., SAUT J.C., « Histoires d'eau–histoires d'ondes », *Images des mathématiques* **95**, 23-30 (1995).

[44] De Vries G., « Bidrage tot de Kebbis der lange golven », thèse de doctorat, université d'Amsterdam (1894).

[45] Dias F., « Quand les vagues deviennent dévastatrices », *La Recherche* **345**, 50-51 (2001).

[46] Dirac P.A.M., *The Principles of Quantum Mechanics*, Oxford University Press (1981).

[47] Edler J., Hamm P., « Self-trapping of the amide I band in a peptide model crystal », *Journal of Chemical Physics* **117**, 2415-2424 (2002).

[48] Edler J., Hamm P., Scott A.C., « Femtosecond study of self-trapped vibrational excitons in crystalline acetanilide », *Physical Review Letters* **88**, 067403 (2002).

[49] Eilbeck J.C., Lombdahl P.S., Scott A.C., « Soliton structure in crystalline acetanilide », *Physical Review B* **30**, 4703-4712 (1984).

[50] Elkin L.O., « Rosalind Franklin and the double helix », *Physics Today* **56**, 42-48 (2003).

[51] Emmerson G.S., « *John Scott Russell. A Great Victorian Engineer and Naval Architect* », John Murray, Londres (1977).

[52] Falcon E., Fauve S., Laroche C., « Observation of a depression solitary surface waves on a thin fluid layer », *Physical Review Letters* **89**, 204501 (2002).

[53] Fei Z., Kivshar Y., Vasquez L., « Resonant kink-impurity interactions in the sine-Gordon model », *Physical Review A* **45**, 6019-6030 (1992).

[54] Fei Z., Konotop V., Peyrard M., Vasquez L., « Kinks in the periodically modulated ϕ^4 model », *Physical Review E* **48**, 548-554 (1993).

[55] Fermi E., Pasta J., Ulam S., « Studies of nonlinear problems. I. », *Los Alamos report*, LA-1940 (1955), publié plus tard in *Collected Papers of Enrico Fermi*, E. Segré (Ed.), University of Chicago Press, Chicago (1965) ; *Nonlinear Wave Motion*, A.C. Newell (Ed.), *Lecture in Applied Mathematics* **15** (AMS, Providence, Rhode Island, 1974) ; *The Many-Body Problem*, C.C. Mattis (Ed.), World Scientific, Singapore (1993).

[56] Feynman R.P., *Le Cours de Physique de Feynman. Mécanique quantique*, InterÉditions, Paris (1979).

[57] Fogel M.B., Trullinger S.E., Bishop A.R., Krumhansl J.A., « Dynamics of sine-Gordon solitons in the presence of perturbations », *Physical Review B* **15**, 1578-1592 (1977).

[58] Frank-Kamennetskii M., « Physicists retreat again », *Nature* **328**, 108 (1987).

[59] Frenkel J., Kontorova T., « On the theory of plastic deformation and twinning », *Journal of Physics* **1**, 137-149 (1939).

[60] Frenkel V. Ya., *Yakov Ilich Frenkel: his Work, Life and Letters*, Birkhäuser Verlag (1996).

[61] Gardner C.S., Greene J.M., Kruskal M.D., Miura R.M., « Korteweg-de Vries equations and generalizations: methods for exact

solutions », *Communications in Pure and Applied Mathematics*, XXVII, 97-133 (1974).

[62] GILLESPIE D.T., « Fluctuation and dissipation in Brownian motion », *American Journal of Physics* **61**, 1078 (1993).

[63] GLAUBER R.J., « Coherent and incoherent states of the radiation field », *Physical Review* **131**, 2766-2788 (1963).

[64] GOLSTEIN H., *Classical Mechanics*, Addison-Wesley, Reeding (1980).

[65] GURSEY F., « Classical statistical mechanics of a rectilinear assembly », *Proceedings of the Cambridge Philosophical Society* **46**, 182-194 (1950).

[66] GUYER R.A., MILLER M.D., « The sine-Gordon chain: equilibrium statistical mechanics », *Physical Review A* **17**, 1205-1217 (1978).

[67] HAMMACK J., MCCALLISTER D., SCHEFFNER N., SEGUR H., « Two-dimensional periodic waves in shallow water. Part 2. Asymetric waves », *Journal of Fluid Mechanics* **285**, 95-122 (1995).

[68] HAMMACK J., SCHEFFNER N., SEGUR H., SCHEFFNER N., SEGUR H., « Two-dimensional periodic waves in shallow water », *Journal of Fluid Mechanics* **209**, 567-589 (1989).

[69] HASEGAWA A., KODAMA Y., « Signal transmission by optical solitons in monomode fiber », *Proceedings IEEE* **69**, 1145-1150 (1981).

[70] HASEGAWA A., TAPPERT F., « Transmission of stationnary nonlinear optical pulses in dispersive dielectric fiber: II. Normal dispersion », *Applied Physics Letters* **23**, 171-172 (1973).

[71] HEEGER A.J., KIVELSON S., SCHRIEFFER J.R., SU W.P., « Solitons in conducting polymers », *Review of Modern Physics* **60**, 781-850 (1988).

[72] HEINRICH P., ROCHE R., MANGENEY A., BOUDON G., « Modéliser un raz-de-marée créé par un volcan », *La Recherche* **318**, 66-71 (1999).

[73] HOGAN M.E., JARDETZKY O., « Internal motions in desoxyribonucleic-Acid II », *Biochemistry* **19**, 3460-3468 (1980).

[74] IKEZI H., « Experiments on ion-acoustic solitary waves », *Physics of Fluids* **16**, 1668-1675 (1973).

[75] INMAN R.B., BALDWIN R.L., « Helix-Random Coil Transitions in DNA Homopolymer Pairs », *Journal of Molecular Biology* **8**, 452-469 (1964).

[76] JACKSON J.D., *Classical Electrodynamics*, John Wiley et Sons, chap. 10, New York (1975).

[77] JOSEPHSON B.D., « Possible new effect in superconductive tunelling », *Physics Letters* **1**, 251-253 (1962).

[78] KADOMTSEV B.B., PETVIASHVILI V.I., « On the stability of solitary waves in weakly dispersing media », *Soviet Physics Doklady* **15**, 539-541 (1970).

[79] KERR W., LOMBDAHL P., « Quantum mechanical derivation of the equations of motions for Davydov solitons », *Physical Review B* **35**, 3629-3632 (1987).

[80] KITTEL C., *Introduction à la Physique de l'État Solide*, Dunod, Paris (1972), chap. 20.

[81] KITTEL C., *Quantum Theory of Solids*, Wiley (1963).

[82] KIVSHAR Y.S., « Dark solitons in nonlinear optics », IEEE *Journal of Quantum Electronics* **28**, 250-265 (1993).

[83] KIVSHAR Y.S., MALOMED B., « Dynamics of solitons in nearly integrable systems », *Review of Modern Physics* **61**, 763-915 (1989).

[84] KODAMA Y., HASEGAWA A., « Nonlinear pulse propagation in a monomode dielectric guide », *IEEE Journal of Quantum Electronics*, QE **23**, 510-524 (1987).

[85] KORTEWEG D.J., DE VRIES G., « On the change of form of long waves advancing in a rectangular canal and on a new type of long stationary waves », *Philosophical Magazine 5th Series*, **36**, 422-443 (1895).

[86] KROLL D.M., LIPOWSKI R., « Universality classes for the critical wetting transition in two dimensions », *Physical Review B* **28**, 5273-5280 (1983).

[87] KRUMHANSL J.A., SCHRIEFFER J.R., « Dynamics and statistical mechanics of a one-dimensional model hamiltonian for structural phase transition », *Physical Review B* **11**, 3535-3545 (1975).

[88] LAMB H., *Hydrodynamics*, Cambridge University Press (1932).

[89] LANDAU L.D., LIFSHITZ E.M., *Mécanique quantique*, Mir (1974).

[90] LANDAU L.D., LIFSHITZ E.M., *Physique statistique*, Mir (1980).

[91] LAX P.D., « Integrals of nonlinear equations of evolution and solitary waves », *Communications on Pure and Applied Mathematics*, **21**, 467-& (1968).

[92] LEROY B., « Nonlinear evolution equations without magic: I. The Korteweg-de Vries equation », *European Journal of Physics* **10**, 82-86 (1990).

[93] LEROY B., « Nonlinear evolution equations without magic: II. The cubic nonlinear Schrödinger equation », *European Journal of Physics* **10**, 87-92 (1990).

[94] LEVY L.P., *Magnétisme et Supraconductivité*, InterÉditions et CNRS Éditions, Paris (1997).

[95] LI Y., RAICHLEN F., « Non-breaking and breaking solitary wave run-up », *Journal of Fluid Mechanics* **456**, 295-318 (2002).

[96] LIPOWSKI R., « Critical effects at complete wetting », *Physical Review B* **32**, 1731-1750 (1985).

[97] LOMBDAHL P.S., SOERENSEN O.H., CHRISTIANSEN P.L., « Soliton excitations in Josephson tunnel junctions », *Physical Review B* **25**, 5737-5748 (1982).

[98] MADDOX J., « Physicists about to hi-jack DNA ? », *Nature* **324**, 11 (1986).

[99] MADDOX J., « Towards the calculation of DNA », *Nature* **339**, 577 (1989).

[100] MAGYARI E., THOMAS H., « Kink instability in planar ferromagnets », *Physical Review B* **25**, 531-533 (1982).

[101] Makhankov V.G., « Dynamics of classical solitons (in non integrable systems) », *Physics Reports* **35**, 1 (1978)
[102] Manneville P., *Structures dissipatives. Chaos et Turbulence*, Aléa Saclay (1991).
[103] Martyna G.J., Klein M.L., Tuckerman M., « Nosé-Hoover chains: The canonical ensemble via continuous dynamics », *Journal of Chemical Physics* **97**, 2635-2643 (1992).
[104] Maury M.F., *The Physical Geography of the Sea and its Meteorology*, Harper, New York (1861).
[105] Messiah A., *Mécanique quantique*, Dunod, Paris (1995).
[106] Mikeska H.J., « Nonlinear dynamics of classical one-dimensional antiferromagnets », *Journal of Physics C* **13**, 2913-2923 (1980).
[107] Mikeska H.J., Steiner M., « Solitary excitations in one-dimensionnal magnets », *Advances in Physics* **40**, 196-356 (1991).
[108] Miles J.W., « The Korteweg-de Vries equation: a historical essay », *Journal of Fluid Mechanics* **106**, 131-147 (1980).
[109] Millar D.P., Robbins R.J., Zewail A.H., « Direct observation of the torsional dynamics of DNA and RNA by picosecond spectroscopy », *Proceedings of the National Academy of Sciences (USA)* **77**, 5593-5597 (1980).
[110] Mollenauer L.F., Stolen R.H., Islam M.N., « Experimental observation of a picosecond pulse narrowing and solitons in optical fibers », *Physical Review Letters* **45**, 1095-1098 (1980).
[111] Morse P.M., Feshbach H., *Methods of Theoretical Physics*, McGraw-Hill, New York (1953).
[112] Morse P.M., Stueckelberg E.C.G., « Diatomic Molecules According to the Wave Mechanics I: Electronic Levels of the Hydrogen Molecular Ion », *Physical Review* **33**, 932-947 (1929).
[113] Nayfeth A.H., *Perturbation Methods*, John Wiley, New York (1973).
[114] Newell A.C., « Nonlinear tunelling », *Journal of Mathematical Physics* **19**, 1126-1133 (1978).
[115] Newell A.C., Moloney J., *Nonlinear Optics*, Addison Wesley, (1992).
[116] Novoselov K.S., Geim A.K., Dubonos S.V., Hill E.W., Grigorieva I.V., « Subatomic movements of a domain wall in the Peierls Potential », *Nature* **426**, 812-816 (2003).
[117] Orlando T.P., Delin K.A., *Foundations of Applied Superconductivity*, Addison Wesley (1991).
[118] Osborne A.R., Burch T.L., « Internal solitons in the Andaman sea », *Science* **208**, 451-460 (1980).
[119] Painter P.C., Mosher L., Rhoads C., « Low frequency modes in the Raman spectrum of DNA », *Biopolymers* **20**, 243-247 (1981).
[120] Paquerot J.-F., Dynamique non linéaire des ondes de pression sanguine dans les grosses artères, thèse de doctorat, université de Bourgogne (1995).

[121] PAQUEROT J.-F., LAMBRAKOS S.G., « Monovariable representation of blood-flow in a large elastic artery », *Physical Review E* **49**, 3432-3439 (1995).

[122] PEIERLS R.E., *Quantum Theory of Solids*, Oxford University Press (1956).

[123] PERRY P.R., SCHIMKE G.R., « Large amplitude internal waves observed off the northwest coast Sumatra », *Journal of Geophysical Research* **70**, 2319-2324 (1965).

[124] PEYRARD M., *Nonlinear Excitations in Biomolecules*, Les Éditions de Physique, Les Ulis (1995).

[125] PEYRARD M., BISHOP A.R., « Statistical mechanics of a nonlinear model for DNA denaturation », *Physical Review Letters* **62**, 2755-2758 (1989).

[126] PEYRARD M., KRUSKAL M.D., « Kink dynamics in the highly discrete sine-Gordon system », *Physica D* **14**, 88-102 (1984).

[127] PRESS W.H., TEUKOLSKY S.A., VETTERLING W.T., FLANNERY B.P., *Numerical Recipes. The Art of Scientific Computing*, Cambridge University Press (1992).

[128] PROHOFSKY E.W., LU K.C., VAN ZANDT L.L., PUTNAL B. F., « Breathing modes and induced resonant melting of the double helix », *Physics Letters A* **70**, 492-494 (1979).

[129] PUTNAM B.F., VAN ZANDT L.L., PROHOFSKY E.W., LU K.C., MEI W.N., « Resonant and localized breathing modes in terminal regions of the DNA double helix », *Biophysical Journal* **35**, 271-287 (1981).

[130] RASMUSSEN J.J., RYPDAL K., « Blow-up in nonlinear Schrödinger equations, a general review », *Physica Scripta* **33**, 481-497 (1986).

[131] REIF F., *Statistical and Thermal Physics*, McGraw Hill (1965).

[132] REMOISSENET M., « Low-amplitude breather and envelope solitons in quasi-one-dimensional physical models », *Physical Review B* **33**, 2386-2392 (1986).

[133] ROCHE S., PEYRARD M., « Impurity effects on soliton dynamics in planar ferromagnets », *Physics Letters A* **172**, 236-242 (1993).

[134] RUELLE D., « Statistical mechanics of a one-dimensional lattice gas », *Communications in Mathematical Physics* **9**, 267-278 (1968).

[135] RUSSELL J.S., « Report on Waves », *Report of the Fourteenth Meeting of the British Association for the Advancement of Science*, John Murray, LondRes, 311-390 (1844).

[136] SAENGER W., *Principles of Nucleic Acid Structure*, Springer, Berlin (1984).

[137] SATSUMA J., YAJIMA S., « Initial Value problem of one dimensional self-modulation of nonlinear waves in dispersive media », *Supplement of the Progress of Theoretical Physics* **55**, 284-306 (1974).

[138] SCHAFFER H.E., FRIEND R.H., HEEGER A.J., « Localized phonons associated with solitons in polyacetylene: Coupling to the nonuniform mode », *Physical Review B* **36**, 7537-7541 (1987).

[139] SCOTT A.C., « Davydov's soliton », *Physics Reports* **217**, 1-67 (1992).

[140] STOLEN R.H., MOLLENAUER L.F., TOMLINSON W.J., « Observation of pulse restoration at the soliton period in optical fibers », *Optics Letters* **8**, 186-188 (1983).

[141] STOLEN R.H., MOLLENAUER L.F., GORDON J.P., TOMLINSON W.J., « Extreme picosecond pulse narrowing by means of soliton effect in single-mode optical fibers », *Optics Letters* **8**, 289-291 (1983).

[142] SU W.P., SCHRIEFFER J.R., HEEGER A.J., « Soliton excitations in polyacetylene », *Physical Review B* **22**, 2099-2111 (1980).

[143] SUNDERMEYER K., *Constrained Dynamics*, Springer, Paris (1982).

[144] SYNOLAKIS C.E., « The run-up of solitary waves », *Journal of Fluid Mechanics* **185**, 523-545 (1987).

[145] THEODORAKOPOULOS N., DAUXOIS T., PEYRARD M., « Order of the phase transition in models of DNA thermal denaturation », *Physical Review Letters* **85**, 6-9 (2000).

[146] TINKHAM M., *Introduction to Superconductivity*, McGraw Hill (1996).

[147] TRAN M.Q., « Ion acoustic solitons in a plasma: A review of their experimental properties and related theories », *Physica Scripta* **20**, 317-327 (1979).

[148] ULAM S.M., *Adventures of a Mathematician*, Charles Scribner's Son, New York, (1976).

[149] URABE H., TOMINAGA Y., « Low-lying collective modes of DNA double helix by raman-spectroscopy », *Biopolymers* **21**, 2477-2481 (1982).

[150] VAN HOVE L., « Sur l'intégrale de configuration pour les systèmes de particules à une dimension », *Physica* **16**, 137-143 (1950).

[151] VARDENY Z., EHRENFREUND E., BRAFMAN O., HOROWITZ B., FUJIMOTO H., TANAKA J., TANAKA M., « Detection of soliton shape modes in polyacetylene », *Physical Review Letters* **57**, 2995-2998 (1986).

[152] VILLAIN J., « Physics on surfaces and with interfaces », dans *Structures et Instabilités*, C. Godrèche (Ed.), EDP Sciences, Paris (1986).

[153] VIRTUAL MOLECULAR DYNAMICS (VMD) : logiciel développé par le « Theoretical and Computational Biophysics Group » du « Beckman Institute for Advanced Science and Technology », University of Illinois at Urbana-Champaign.

[154] WANG X., BROWN D.W., LINDENBERG K., « Quantum Monte Carlo Simulation of the Davydov model », *Physical Review Letters* **62**, 1796 (1989).

[155] WATSON J.D., CRICK F.H.C., « A structure for Deoxyribose Nucleic Acide », *Nature* **171**, 737-738 (1953).

[156] WYSIN G.M., *Classical Kink Dynamics and Quantum Thermodynamics in Easy-plane Magnetic Chains with an Applied Magnetic Field*, thèse de doctorat, université de Cornell (1985).

[157] WYSIN G.M., BISHOP A.R., KUMAR P., « Soliton dynamics on a ferromagnetic chain », *Journal of Physics C* **15**, L337-L343 (1982) ; « Soliton dynamics on an easy-plane ferromagnetic chain », *Journal of Physics C* **17**, 5975-5991 (1984).

[158] WYSIN G.M., BISHOP A.R., OITMAA J., « Single kink dynamics in an easy-plane classical antiferromagnetic chain », *Journal of Physics C* **19**, 221-233 (1986).

[159] ZABUSKY N.J., « Computational Synergetics and Mathematical Innovation », *Journal of Computational Physics* **43**, 195-249 (1981).

[160] ZABUSKY N.J., KRUSKAL M.D., « Interaction of solitons in a collisionless plasma and the recurrence of initial states », *Physical Review Letters* **15**, 240-243 (1965).

[161] ZAKHAROV V.E., SHABAT A.B., « Exact theory of two-dimensional self-focusing and one-dimensional self-modulation of waves in nonlinear media », *Soviet Physics Journal of Experimental and Theoretical Physics* **34**, 62-69 (1972).

[162] ZAKHAROV V.E., SYNAKH V.S., « The nature of the self focusing singularity », *Soviet Physics Journal of Experimental and Theoretical Physics* **41**, 465-468 (1976).

Index